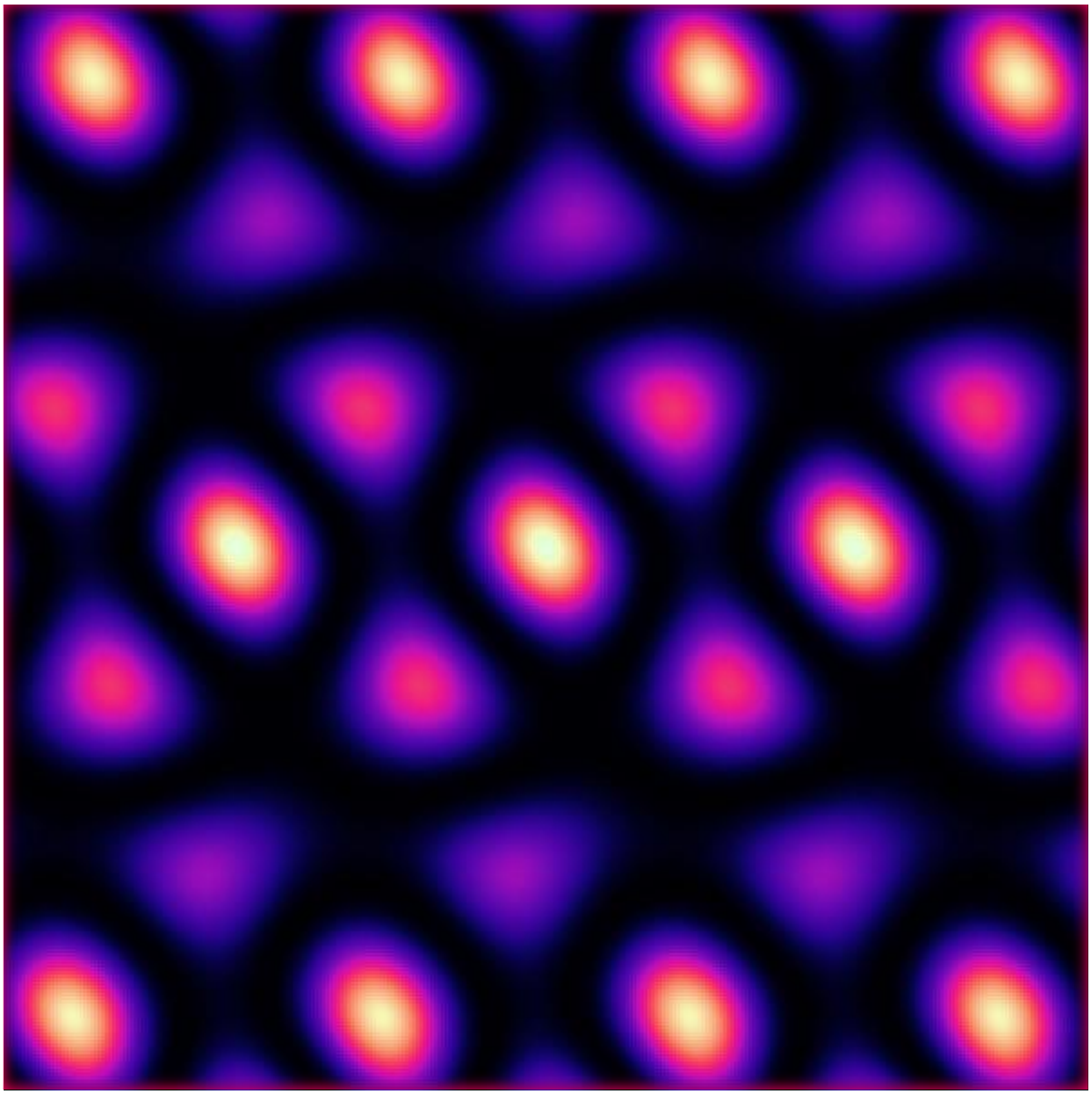
FÍSICA MODERNA

NOTAS SOBRE LA TEORÍA Y PROBLEMAS RESUELTOS



Alejandro Valderrama

FÍSICA MODERNA

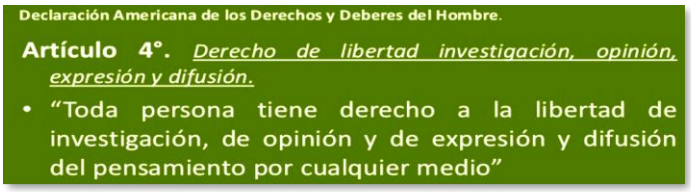
NOTAS SOBRE LA TEORÍA Y PROBLEMAS RESUELTOS

Autor: A. Valderrama

© 2025 A. Valderrama. Todos los derechos reservados.

DESCARGO DE RESPONSABILIDAD

- Los temas desarrollados han sido elaborados de manera original por el Autor para la impartición de algunos cursos en la Facultad de Ciencias, UNAM.
- La información presentada ha sido tomada de múltiples fuentes, algunas referidas en la bibliografía del curso y otras de información disponible en la Internet de *dominio público*.
- Algunos párrafos pueden ser tomados textuales o traducidos, o algunas fotos reproducidas de manera directa o indirecta, en todos los casos se ha realizado un trabajo de recopilación, organización y edición original.
- En ningún momento el realizador pretende adjudicarse la autoría de ninguna de todas las partes componentes de este material didáctico; más, sin embargo, sí la autoría y propiedad de la composición como material didáctico terminado o en desarrollo.



Primera edición. Ciudad de México, 2025.

Prohibida la reproducción total o parcial de esta obra por cualquier medio sin la autorización expresa del autor. Cualquier cita o referencia deberá mencionar la fuente completa.

Para contacto o correspondencia académica:

✉ [alecvald@ciencias.unam.mx]

Prólogo del Autor

El presente documento es un breviario de Física Moderna construido con información de varios cursos, y está dirigido a quien quiera o necesite tener a la mano un breviario de las formulaciones básicas con explicaciones concisas, para preparar un examen sobre el tema a nivel licenciatura o posterior (según la carrera o especialidad). No es un texto para una primera aproximación a la materia, más bien es un resumen compacto de Física Moderna, para quien ya ha estudiado temas relacionados y requiere estructurarlos.

Durante la época de exámenes pude apreciar en muchos compañeros cierta incertidumbre para agrupar información de diferentes temas de Física Moderna, de manera que elaboré estás notas y parece que, en ese grupo de estudiantes de química, física, nutrición, tecnología avanzada, etc., tuvieron éxito y fueron añadidas al material de estudio.

También pueden ser de utilidad para quien desee un repaso rápido antes de incursionar en las materias de Relatividad o de Mecánica Cuántica, o simplemente como breviario de quien quiera aplicar conceptos básicos de Física Moderna en sus trabajos.

Aunque ciertamente las notas están incompletas, en muchos casos se encuentran demostraciones y desarrollos fáciles; y problemas ilustrativos resueltos, cuyo cometido es remarcar el grupo de ecuaciones que gobiernan los resultados más básicos y poderosos, por la gran cantidad de problemas que se pueden resolver al aplicar las formulaciones presentadas.

La complejidad de la física actual nos obliga a tener en mente una buena estructura de pensamiento matemático, que debe trabajarse continuamente y de todas las maneras posibles, espero que de esta forma le sea de utilidad a alguien más…

TABLA DE CONTENIDO

I. Conceptos fundamentales de Física Clásica 5
I.1 Leyes de Newton 5
I.2 Electricidad y Magnetismo 5
I.3 Oscilaciones y Ondas 7
I.4 Leyes de la Termodinámica 9
I.5 Relatividad Especial (cinemática relativista) 10
1.6 Relatividad Especial (dinámica relativista) 13
II. Partículas y Ondas 17
II.1 Leyes de Radiación Térmica 17
II.2 Efecto Fotoeléctrico 26
Teoría cuántica del efecto fotoeléctrico: 27
II.3 Efecto Compton 31
II.4 Difracción de partículas 35
II.5 Hipótesis de De Broglie 37
II.6 Principio de incertidumbre 39
III. Mecánica Cuántica 43
III.1 Fundamentos I 43
III.2 Fundamentos II 49
IV. El Átomo de un Electrón 66
IV.1 Modelo Atómico de Bohr-Rutherford 66
IV.2 El Átomo de un Electrón 75
V. Átomos Multi-electrónicos 89
V.1 Principio de exclusión de Pauli 89
VI. Moléculas 102
VI.1 Enlaces: 102
VI.2 Espectros moleculares (moléculas diatómicas): 107
Formularios 122

I. Conceptos fundamentales de Física Clásica

I.1 Leyes de Newton

1ª Ley de la Inercia: Todo cuerpo persevera en su estado de reposo o movimiento uniforme y rectilíneo a no ser que sea obligado a cambiar su estado por fuerzas que actúen sobre él.

2ª Ley de Fuerza: El cambio en la velocidad del movimiento de un cuerpo es proporcional a la fuerza motriz impresa y ocurre en la línea recta a lo largo de la cual aquella fuerza actúa: $\boldsymbol{F = ma = dp/dt}$.

3ª Ley de Acción y Reacción: A toda acción corresponde una reacción de igual magnitud y dirección contraria; o sea, las acciones mutuas de dos cuerpos siempre son iguales y dirigidas en sentido opuesto: $\boldsymbol{F_{12} = -F_{21}}$.

Un objeto de masa m moviéndose a una velocidad v tiene una energía cinética: $K = mv^2/2$, y un *impulso lineal* $\boldsymbol{p = mv}$. Cuando ese objeto choca con otro, la colisión se analiza aplicando tres leyes de conservación fundamentales:

Conservación de la energía: La energía de un sistema aislado siempre permanece constante. Es decir, que la energía total de dos partículas antes de colisionar es igual a la energía total después de la colisión.

Conservación del impulso lineal: El impulso o momento lineal total de un sistema aislado permanece constante. Así que, el impulso total de dos partículas antes y después de una colisión será el mismo; y como es una cantidad vectorial, se tiene que se conservará en cada una de las componentes espaciales *(x, y, z)*.

Cuando una partícula se mueve en un campo de fuerzas conservativo; es decir, un espacio en que el trabajo neto realizado, $W = \int F \cdot ds$, no depende de la trayectoria sino únicamente de las posiciones inicial y final, se puede definir una energía potencial, tal que: $F \equiv -dV/dx$ (para el caso de una sola dimensión).

La energía mecánica total E es justamente la suma de las energías cinética y potencial; es decir, $E = K + V$.

Conservación del impulso angular: Cuando un objeto moviéndose con impulso lineal $\boldsymbol{p}$ se encuentra a una distancia $\boldsymbol{r}$ del origen O de un sistema de coordenadas, el *impulso o momento angular* $\boldsymbol{l}$ respecto al punto O se define como: $\boldsymbol{l = r \times p}$.

Y nuevamente, para un sistema aislado de una o varias partículas, el momento angular, se conserva; es decir, siempre y cuando no haya un *torque* externo neto que actúe sobre el sistema.

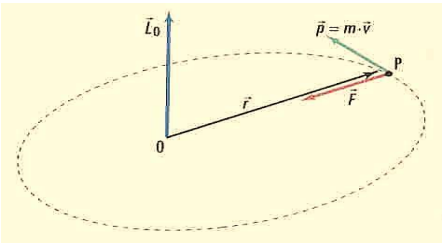


Figura I.1.1: Impulso o momento angular.

I.2 Electricidad y Magnetismo

Fuerza electrostática: Es la fuerza de Coulomb entre dos partículas cargadas q_1 y q_2: $F = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$; donde, $1/4\pi\epsilon_0 = 8.988 \times 10^9 N \cdot m/C^2$ y r es la separación entre las cargas.

La energía potencial correspondiente se define por: $V = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Campo electromagnético: Se caracteriza por su intensidad de campo eléctrico $\boldsymbol{E}$ y de campo magnético $\boldsymbol{B}$.

Campo eléctrico: El campo eléctrico radial debido a una carga q localizada en el origen de un sistema coordenado está dado por la ecuación: $\boldsymbol{E} = q\hat{\boldsymbol{r}}/4\pi\epsilon_0 r$; donde $\hat{\boldsymbol{r}}$ es un vector unitario en la dirección radial.

Campo magnético generado por un alambre con corriente: El campo magnético a una distancia r de un alambre largo, recto a la largo del eje Z de un sistema de coordenadas, y a través del cual circula una corriente, es: $\boldsymbol{B} = \mu_0 i\widehat{\boldsymbol{\theta}}/2\pi r$; donde $\widehat{\boldsymbol{\theta}}$ es un vector en la dirección θ en coordenadas cilíndricas.

Campo magnético generado por una espira de corriente: Una corriente eléctrica i causa un campo magnético B; en una espira circular de corriente de radio r, el campo magnético de la espira está dado por: $B = \mu_0 i/2r$.

En unidades del SI (Sistema Internacional) se mide en teslas, $1\ T = 1\ N/A \cdot m$. La constante $\mu_0 = 4\pi \times 10^7 N \cdot s^2/\ C^2$. Hay que recordar que la corriente i fluye en la dirección convencional (positiva) opuesta al sentido real en el que viajan los electrones cargados negativamente que da lugar a la corriente.

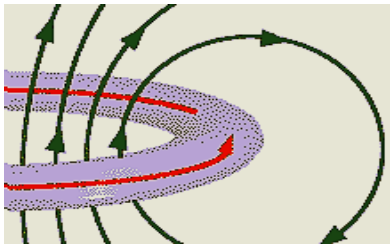


Figura I.1.2: Campo magnético.

Momento magnético: Para el caso de una espira de corriente se define el momento magnético $|\boldsymbol{\mu}| = iA$; donde A es el área geométrica que la espira encierra. La dirección de $\boldsymbol{\mu}$ es perpendicular al plano de la espira.

Cuando una espira de corriente se coloca en un campo magnético externo $\boldsymbol{B}_{ext}$ aparece una torca $\boldsymbol{\tau}$ sobre la espira que tiende a alinear el momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ con $\boldsymbol{B}_{ext}$; de modo que: $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu} \times \boldsymbol{B}_{ext}$.

Lo anterior también se puede interpretar asignando una energía potencial al momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ en el campo externo $\boldsymbol{B}_{ext}$, de modo que: $V = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}_{ext}$. La espira gira de modo que el potencial tiende a su valor mínimo; es decir, cuando $\boldsymbol{\mu}$ y $\boldsymbol{B}_{ext}$ son paralelos.

Fuerza de Lorentz: Es la fuerza ejercida por un campo electromagnético sobre una carga: $\boldsymbol{F} = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B})$.

Ecuaciones de Maxwell:

Nombre	Forma diferencial	Forma integral
Ley de Gauss:	$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0};\ \rho = \frac{Q}{V}$	$\oint_S \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{s} = \frac{Q}{\epsilon_0}$
Ley de Gauss para el campo magnético:	$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0$	$\oint_S \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{s} = 0$
Ley de Faraday:	$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}$	$\oint_C \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{l} = -\frac{d}{dt}\oint_S \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{s}$
Ley de Ampere generalizada:	$\nabla \times \boldsymbol{B} = \mu_0 \boldsymbol{J} + \mu_0\epsilon_0 \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}$	$\oint_C \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{l} = \mu_0 \oint_S \boldsymbol{J} \cdot d\boldsymbol{s} + \mu_0\epsilon_0 \frac{d}{dt}\oint_S \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{s}$

Donde, $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} C^2/\ J \cdot m;\ \mu_0 = 4\pi \times 10^7 N \cdot s^2/\ C^2$.

I.3 OSCILACIONES Y ONDAS

Onda electromagnética: Se produce cuando una carga se acelera o una corriente varía con el tiempo, generando una variación de $\boldsymbol{E}$ y $\boldsymbol{B}$ con la posición r y en el tiempo t.

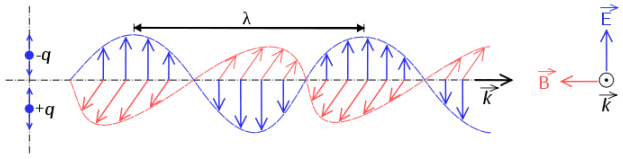


Figura I.1.3: Onda electromagnética.

Una onda electromagnética plana que viaja en la dirección X puede ser descrita en su forma más simple como:

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E_0}\, sin(kx - \omega t + \phi)\hat{\boldsymbol{z}}$$
$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B_0}\, sin(kx - \omega t + \phi)\hat{\boldsymbol{y}} \qquad \textbf{[I.1.1]}$$

Donde $k = 2\pi/\lambda\ [rad/m]$ es el número de onda (ciclos por unidad de longitud), $\omega = 2\pi\nu\ [rad/s]$ la frecuencia angular (el ángulo girado por unidad de tiempo) y ϕ es una fase o corrimiento respecto del origen del sistema coordenado. La frecuencia de la onda y su periodo están relacionados por la expresión $\nu = 1/T\ [Hz]$; y λ y ν, a su vez por la ecuación: $c = \lambda\nu$.

Polarización de una onda electromagnética: Se representa por el vector $\boldsymbol{E}_0$, que determina el plano de polarización junto con la dirección de propagación $\boldsymbol{S}$, en este caso el eje X; así definidos determinan la dirección de $\boldsymbol{B}_0$, ya que se debe cumplir necesariamente:

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B}/\mu_0 \qquad \textbf{[I.1.2]}$$

Para la onda plana, esto conduce a:

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{\mu_0} E_0 B_0\, sin^2(kx - \omega t + \phi)\, \hat{\boldsymbol{x}} \qquad \textbf{[I.1.3]}$$

Vector de Poynting S: Establece la dirección de propagación de la onda electromagnética y tiene dimensiones de energía por unidad de tiempo y área, $[J/s \cdot m^2] = [W/m^2]$.

Potencia P transportada por una onda electromagnética: Está dada por $P = |\boldsymbol{S}| = |\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B}/\mu_0|$; y como se tiene que $\boldsymbol{E} = c\boldsymbol{B}$ se puede escribir:

$$P = \frac{1}{\mu_0 c} E_0^2\, sin^2(kx - \omega t + \phi) \qquad \textbf{[I.1.4]}$$

Así que es proporcional al cuadrado de la amplitud de la onda. Como la amplitud varía en el tiempo puede calcularse un promedio $\bar{P}$ para un intervalo dado, así entonces:

$$\bar{P} = \frac{1}{T}\int_0^T P dt = \frac{E_0^2}{2\mu_0 c} \qquad \textbf{[I.1.5]}$$

Ya que el valor promedio de $sin^2(\theta)$ es $1/2$.

Una onda electromagnética puede entenderse como una perturbación que se propaga en el espacio electromagnético y se expresa como una función de la posición y del tiempo $\psi(\boldsymbol{r}, t)$.

Matemáticamente, dicha función es una onda si se verifica que: $\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t^2}$, donde v es la velocidad de propagación de la onda.

Hay dos velocidades diferentes asociadas a las ondas, la primera es la velocidad de fase, que es la velocidad de propagación de la onda: $v_p = \lambda\nu = \frac{\omega}{k}$. La segunda es la velocidad de grupo, la cual da la velocidad con la que las variaciones en la forma de la amplitud de la onda se propagan por el espacio: $v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k}$.

Ondas electromagnéticas en medios no conductores: En los medios en los que no hay cargas ni corrientes libres, las ecuaciones de los campos electromagnéticos son:

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E} = 0, \qquad \nabla\cdot\boldsymbol{B} = 0, \qquad \nabla\times\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} = 0, \qquad \nabla\times\boldsymbol{B} - \frac{\epsilon\mu}{c}\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} = 0 \qquad \text{[I.1.6]}$$

Donde, $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{D}/\varepsilon$ y $\boldsymbol{B} = \mu\boldsymbol{H}$.

Tomando el rotacional de la tercera ecuación: $\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\nabla\times\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} = \boldsymbol{0}$,

lo cual permite cambiar el orden de las derivadas espacial y temporal; y usando las identidades de operadores vectoriales, al sustituir $\nabla\times\boldsymbol{B}$ en la ecuación se tiene: $\nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{E}) - \nabla^2\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\epsilon\mu}{c}\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}\right) = 0$;

pero: $\nabla\cdot\boldsymbol{E} = 0, \quad \Rightarrow \quad \nabla^2\boldsymbol{E} - \frac{\epsilon\mu}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{E}}{\partial t^2} = 0$.

Realizando operaciones análogas en la cuarta ecuación, se obtiene: $\nabla^2\boldsymbol{B} - \frac{\epsilon\mu}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{B}}{\partial t^2} = 0$.

Ambas son ecuaciones de onda. Del coeficiente de las derivadas temporales, se ve que la velocidad de propagación de las ondas es $v = c/\sqrt{\epsilon\mu}$. Debido a que en la mayoría de los materiales $\epsilon > 1$ y $\mu \approx 1$, la velocidad de propagación en esos medios es $< c \approx 3\,x\,10^8\ m/s$, que es la velocidad de la luz en el espacio vacío (para la cual $\epsilon = 1, \mu = 1$).

Las ecuaciones anteriores son vectoriales, de modo que son válidas para cada componente rectangular.

Ondas planas: Para hallar estas soluciones se elige la dirección de propagación perpendicular $\hat{e}_x$.

$\Rightarrow$ en general para cada componente se tiene: $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0$; $v = \frac{c}{\sqrt{\epsilon\mu}}$ "*Onda monocromática*".

La solución general de la ecuación de onda unidimensional es:

$$\psi(x,t) \sim e^{ik(x-vt)} = e^{i(kx-\omega t)} = \cos(kx-\omega t) + i\sin(kx-\omega t); \quad k = \frac{\omega}{v} = \frac{\omega\sqrt{\epsilon\mu}}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}; \qquad \text{[I.1.7]}$$

El índice de refracción definido por la razón de velocidades c/v se puede escribir como: $n = \sqrt{\epsilon\mu}$ lo cual establece una la conexión entre el enfoque electromagnético y el óptico.

Para considerar una dirección de propagación más general se define $|\boldsymbol{k}| = k$ perpendicular al frente de onda. De modo que para una dirección arbitraria se tiene: $\psi(\boldsymbol{r},t) \sim e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$.

Entonces puede escribirse una onda electromagnética plana, monocromática en la forma:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{E}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \quad \text{y} \quad \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{B}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \qquad \text{[I.1.8]}$$

La derivada en el tiempo de una onda así es simple: $\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = -i\omega\boldsymbol{E}$.

I.4 Leyes de la Termodinámica

Ley Cero: Existe una determinada propiedad denominada *temperatura empírica*, θ, que es común para todos los estados de equilibrio termodinámico que se encuentren en equilibrio mutuo con uno dado.

El equilibrio termodinámico de un sistema se define como: la condición en el cual las variables empíricas usadas para definir un estado del sistema (presión, volumen, campo eléctrico, polarización, magnetización, tensión lineal, tensión superficial, coordenadas en el plano X, Y) no son dependientes del tiempo.

1ª Ley de la conservación de la energía: Si se realiza trabajo sobre un sistema; o bien, éste intercambia calor con otro, la energía interna del sistema cambiará: $E_{entra} - E_{sale} = \Delta E_{sistema}$, $\Delta U = Q - W$.

2ª Ley de la Entropía: Esta ley marca la dirección en la que deben llevarse a cabo los procesos termodinámicos y, por lo tanto, la imposibilidad de que ocurran en el sentido contrario. También puede expresarse como: $S = k_B \cdot ln\,\Omega$, donde, S es la entropía, k_B la constante de Boltzmann y Ω el número de microestados posibles.

Enunciado de Clausius: No es posible un proceso cuyo resultado sea la extracción de calor de un recipiente y la absorción de una cantidad igual de calor por un recipiente a temperatura más elevada.

Enunciado de Kelvin: No existe ningún dispositivo que, operando por ciclos, absorba calor de una única fuente (energía absorbida) y lo convierta íntegramente en trabajo (energía útil).

Enunciado de Kelvin-Planck: Es imposible una máquina térmica que, operando en un ciclo, no produzca otro efecto que la absorción de energía desde un depósito y la realización de una cantidad igual de trabajo.

Es imposible construir una máquina térmica cíclica que transforme calor en trabajo sin aumentar la energía termodinámica del ambiente.

Debido a esto podemos concluir, que el rendimiento energético de una máquina térmica cíclica que convierte calor en trabajo siempre será menor a la unidad, y ésta estará más próxima a la unidad, cuanto mayor sea el rendimiento energético de la misma. Es decir, cuanto mayor sea el rendimiento energético de una máquina térmica, menor será el impacto en el ambiente, y viceversa.

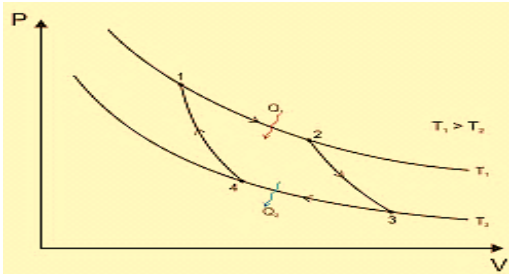


Figura I.1.4: Diagrama del ciclo de Carnot.

3ª Ley de Nernst: Es imposible alcanzar el cero absoluto de temperatura con un número finito de procesos físicos. A medida que un sistema se aproxima al cero absoluto, su entropía tiende a un valor constante.

Es importante recordar que los principios o leyes de la termodinámica son sólo generalizaciones estadísticas, válidas siempre para los sistemas macroscópicos, pero inaplicables a nivel cuántico.

Teoría Cinética Molecular:

La ley de los gases ideales o ecuación de estado es: $PV = nRT = Nk_BT$, n es el número de moles ($1\ mol = 6.022 \times 10^{23}$ moléculas), $R = 0.082\ atm \cdot L/(mol \cdot K)$ es la constante universal de los gases. O bien, N el número de partículas y $k_B = 1.380 \times 10^{-23} J/K$ es la constante de Boltzmann.

La ecuación cinética térmica media para las moléculas de un gas ideal a temperatura T es: $E_c = \frac{3}{2}k_BT$, expresa que la energía cinética de un gas es directamente proporcional a la temperatura (K).

La ley de la conservación de la energía: Constituye el primer principio de la termodinámica y afirma que la cantidad total de energía en cualquier sistema físico aislado (sin interacción con ningún otro sistema) permanece invariable con el tiempo, aunque dicha energía puede transformarse en otra forma de energía.

I.5 Relatividad Especial (Cinemática Relativista)

Primer Postulado: No existe un sistema de referencia absoluto. Las leyes de la física son las mismas en todos los sistemas de referencia inerciales (que se mueven con velocidad constante).

Segundo Postulado: La velocidad de la luz en él vacío es una constante universal que es igual para todos los observadores en sistemas inerciales y es independiente del movimiento de la fuente emisora: $c = 3 \times 10^8\ m/s$.

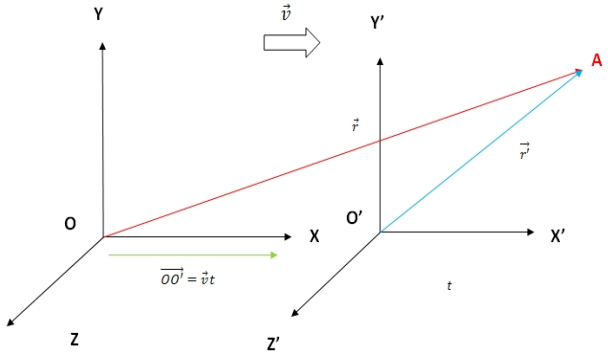


Figura I.1.5: Sistemas de referencia S y S' inerciales.

Transformaciones de Lorentz: Supóngase ahora una transformación de coordenadas de la forma:

$$x' = \gamma(x - vt) \Leftrightarrow x = \gamma(x' - vt') \qquad \textbf{[I.1.9]}$$

Sustituyendo el valor de x' de la primera ecuación en la segunda se tiene: $x = \gamma^2(x - vt) - \gamma vt'$, de donde:

$$t' = \gamma t + \left(\frac{1-\gamma^2}{\gamma v}\right)x \qquad \textbf{[I.1.10]}$$

Ahora bien, por el segundo postulado: $x = ct$ y $x' = ct'$. Sustituyendo x' y t' de esta última ecuación con ayuda de la ecuación **[I.1.9]** y de la ecuación **[I.1.10]** se obtiene:

$$\gamma(x - vt) = c\gamma t + \left(\frac{1-\gamma^2}{\gamma v}\right)cx \qquad \textbf{[I.1.11]}$$

que al despejar x se torna en:

$$x = \frac{c\gamma t + v\gamma t}{\gamma - \left(\frac{1-\gamma^2}{\gamma v}\right)c} = ct\left[\frac{\gamma + \frac{v}{c}\gamma}{\gamma - \left(\frac{1-\gamma^2}{\gamma v}\right)c}\right] = ct\left[\frac{1+\frac{v}{c}}{1-\left(\frac{1}{\gamma^2}-1\right)\frac{c}{v}}\right] \qquad \textbf{[I.1.12]}$$

Pero esta última expresión debe ser igual a $x = ct$, siempre y cuando la cantidad entre paréntesis valga 1. De este paréntesis al igualarlo con 1 y despejar γ se obtiene el conocido *factor de Lorentz*:

$$\gamma = \left[1 - v^2/c^2\right]^{-1/2} \geq 1 \qquad \textbf{[I.1.13]}$$

Al usar este resultado en las ecuaciones **[I.1.4]** y **[I.1.5]** se obtienen las conocidas transformaciones de Lorentz:

$$x' = [x - vt]\gamma, \quad y' = y, \quad z' = z\,; \quad t' = [t - vx/c^2]\gamma \qquad \textbf{[I.1.14]}$$

Como consecuencia de las transformaciones de Lorentz se tienen los siguientes resultados:

Dilatación del tiempo: Considérese un reloj luminoso. Para un observador que se encuentra en reposo respecto del reloj, el tiempo "propio" en que la señal luminosa recorre la distancia L_0 de ida y vuelta es $t_0 = 2L_0/c$.

Para un observador que se mueve a una velocidad v perpendicular, la señal luminosa recorrerá una distancia total ct; donde, $(ct/2)^2 = L_0^2 + (vt/2)^2$.

De modo que: $\frac{t^2}{2}(c^2 - v^2) = L_0^2 \quad \Rightarrow \quad t = \frac{2L_0/c}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$.

$$\therefore\ t = t_0\gamma.$$

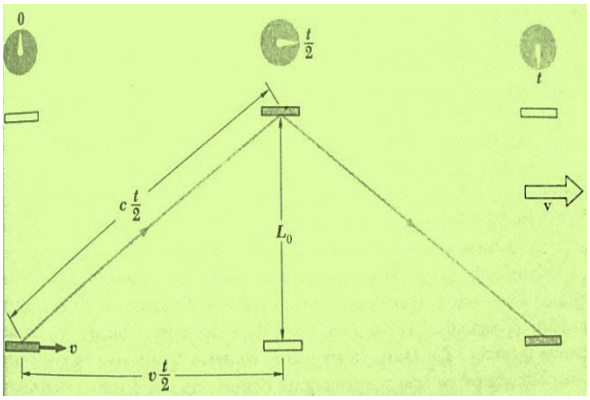


Figura I.1.6: Reloj luminoso: $\bar{v} \perp L_0$.

Contracción de la longitud: Se considera nuevamente un reloj luminoso y de nuevo para el observador que está en reposo respecto del reloj el tiempo "propio" de recorrido, ida y vuelta de la señal es $t_0 = 2L_0/c$.

Para un observador con velocidad v paralela a la señal luminosa, la distancia recorrida de ida será $ct_1 = L + vt_1$, es decir que: $t_1 = L/(c - v)$.

La distancia de vuelta será: $c(t - t_1) = L - v(t - t_1)$; de donde: $t - t_1 = L/(c + v)$.

Sustituyendo t_1 se obtiene: $t = \frac{L}{(c+v)} + \frac{L}{(c-v)} = \frac{2Lc}{(c+v)(c-v)}$.

de modo que $t = \frac{2L/c}{1-v^2/c^2}$, igualando con la expresión para t,

Entonces: $$L = L_0/\gamma.$$

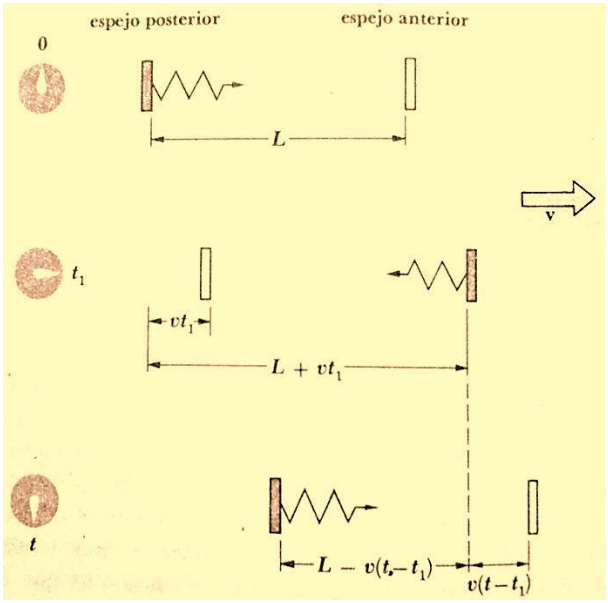


Figura I.1.7: Reloj luminoso: $\bar{v} \parallel L_0$.

Ejemplo I.1.1: Un observador se encuentra en una plataforma espacial de 60 m de longitud en el momento que un asteroide alargado de alta velocidad pasa a velocidad $v = 0.80\ c$. El observador notó que, en un instante dado, la parte delantera y trasera del asteroide se alineaban exactamente con los extremos de la plataforma. a) ¿Cuál es la longitud propia del asteroide? b) desde el sistema de referencia del asteroide que longitud tiene la plataforma? c) desde el sistema de referencia del asteroide, los extremos de este no se alinearán exactamente con los extremos de la plataforma. Encontrar el intervalo de tiempo que transcurre entre la alineación del extremo delantero del asteroide y el extremo trasero con los de la plataforma.

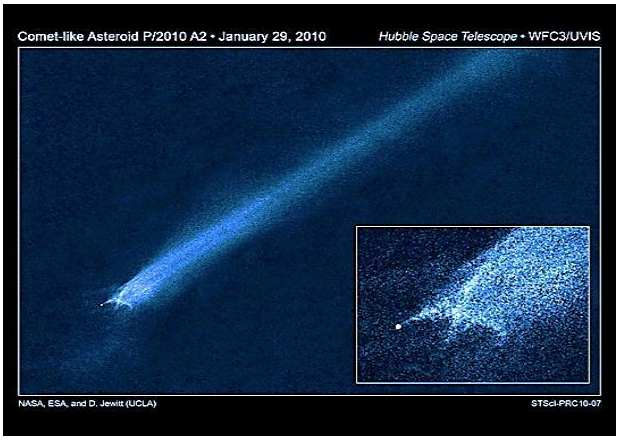


Figura I.1.8: Asteroide captado por el Hubble.

Solución: a) Ya que el observador mide una longitud contraída del asteroide, pero la longitud propia de la plataforma es $60\ m$, la longitud propia del asteroide será:

$$L_A = \frac{L'_A}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = \frac{60\ m}{\sqrt{1-(0.8)^2}} = 100\ m.$$

b) Desde el sistema de referencia del asteroide la longitud de la plataforma estará contraída:

$$L'_P = L_P\sqrt{1-v^2/c^2} = (60\ m)\sqrt{1-(0.8)^2} = 36m.$$

c) El intervalo de tiempo entre la parte delantera alineándose con un extremo de la plataforma y la parte trasera alineándose con el otro, es justamente la distancia "recorrida" por la plataforma, $100\ m - 36\ m = 64\ m$, dividida entre la velocidad relativa:

$$\Delta t = \frac{64\ m}{2.4\times10^8\ m/s} = 2.7\times10^{-7}\ s.$$

Por lo tanto, dos eventos que son simultáneos en un marco de referencia ocurren con 2.7×10^{-7} segundos de diferencia en el otro sistema de referencia, que se mueve con una velocidad relativa respecto del primero.

¡En relatividad, la simultaneidad entre dos eventos depende del sistema de referencia, a menos que los dos eventos ocurran en el mismo punto del espacio! ■

Efecto Doppler clásico y relativista: Desde el punto de vista clásico de las ondas sonoras, para las cuales la fuente y el observador se pueden mover con velocidades v_s y v_o con respecto al medio, la frecuencia v' que percibe el observador es diferente a la frecuencia emitida por la fuente, de modo que: $v' = v(v \pm v_o)/(v \mp v_s)$, donde v es la velocidad de las ondas en el medio (velocidad del sonido) y los signos se eligen según si el movimiento es de aproximación o alejamiento entre la fuente y el observador, respectivamente.

En el caso relativista no existe un *medio* en el cual las ondas electromagnéticas se propaguen de modo que el efecto Doppler debe contener únicamente la información del desplazamiento relativo entre la fuente y el observador en movimiento. Así, para una fuente de luz que emite una frecuencia v, un observador en un sistema de referencia S' que se mueva con velocidad u con respecto de la fuente, medirá una frecuencia mayor al acercarse y una menor en caso de alejarse de la fuente.

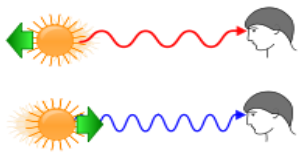


Figura I.1.9: Efecto Doppler.

Si T' es el tiempo entre crestas de la onda medido por el observador en movimiento y λ' es la longitud de onda determinada por este observador, la distancia entre las crestas de las ondas es: $\lambda' = (c-u)T'$. Pero según la ecuación para la dilatación del tiempo: $T' = T\gamma$; donde, $T = 1/v$.

La longitud de onda medida por el observador en movimiento debe cumplir el hecho de que: $c = \lambda' v'$. Entonces:

$$\frac{c}{v'} = (c-u)\frac{T}{\sqrt{1-u^2/c^2}} = \frac{1}{v}\frac{(c-u)}{\sqrt{1-u^2/c^2}} \qquad \textbf{[I.1.15]}$$

O bien,

$$v' = v\frac{\sqrt{1-u^2/c^2}}{1-u/c} = v\sqrt{\frac{1+u/c}{1-u/c}} \qquad \textbf{[I.1.16]}$$

Que es la fórmula para el efecto Doppler que es consistente con los postulados de la relatividad de Einstein. Si el movimiento entre la fuente y el observador es de alejamiento se reemplaza u por $-u$.

Ejemplo I.1.2: Una galaxia distante se aleja de la Tierra a tan alta velocidad que la línea azul de hidrógeno a 431 nm se registra a 600 nm, en el intervalo correspondiente al rojo en el espectro. ¿Cuál es la velocidad de la galaxia respecto a la Tierra?

Solución: Usando **[I.1.11]**: $\nu' = \nu\sqrt{\frac{1-u/c}{1+u/c}}$; y como $\nu = \frac{c}{\lambda}$ y $\nu' = \frac{c}{\lambda'}$; entonces, $\lambda' = \lambda\sqrt{\frac{1+u/c}{1-u/c}}$, $\therefore \ \frac{u}{c} = 0.31$. ■

Transformación relativista de la velocidad: Considérese un objeto en movimiento respecto de los sistemas inerciales S y S' que se mueven con velocidad relativa v. Las componentes de su velocidad se pueden expresar en ambos sistemas como:

$$\text{En } S: \quad V_x = \frac{dx}{dt}, \quad V_y = \frac{dy}{dt}, \quad V_z = \frac{dz}{dt}; \qquad \text{y en } S': \quad V'_x = \frac{dx'}{dt}, \quad V'_y = \frac{dy'}{dt}, \quad V'_z = \frac{dz'}{dt}. \qquad \textbf{[I.1.17]}$$

Diferenciando las ecuaciones de transformación inversa de Lorentz se tiene:

$$dx = [dx' + vdt']\gamma, \quad dy = dy', \quad dz = dz'; \quad dt = [dt' + vdx'/c^2]\gamma \qquad \textbf{[I.1.18]}$$

De este modo, $V_x = \frac{dx}{dt} = \frac{dx'+vdt'}{dt'+vdx'/c^2} = \frac{\frac{dx'}{dt'}+v}{1+\frac{vdx'}{c^2dt'}}$; o bien,

$$V_x = \frac{V'_x + v}{1+\frac{vV'_x}{c^2}}, \quad V_y = \frac{V'_y\sqrt{1-v^2/c^2}}{1+\frac{vV'_y}{c^2}}, \quad V_z = \frac{V'_z\sqrt{1-v^2/c^2}}{1+\frac{vV'_z}{c^2}}. \qquad \textbf{[I.1.19]}$$

1.6 RELATIVIDAD ESPECIAL (DINÁMICA RELATIVISTA)

Considérese un choque elástico (en que se conserva la energía cinética) entre dos partículas idénticas A y B, con masas m_A y m_B respectivamente, visto por observadores situados en sistemas de referencia inerciales S y S' con movimiento relativo a velocidad constante v en la dirección del eje X. Estando antes del choque la partícula A en reposo respecto del sistema S y la partícula B con respecto al sistema S'. En el mismo instante, A se lanza en dirección $+Y$ con velocidad V_A, y B en el sentido $-Y$ con velocidad V'_B.

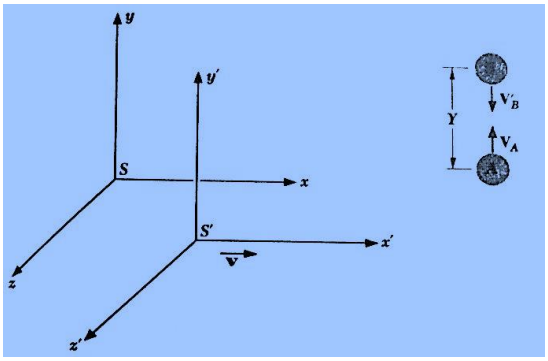


Figura I.1.10: Choque elástico.

De modo que $V_A = V'_B$.

En estas condiciones, el comportamiento de A, visto desde S, es exactamente el mismo que el de B visto desde S'. Si las partículas se lanzan desde posiciones separadas una distancia Y, a un observador en A le parecerá que el choque ocurre en $y = Y/2$, y a uno en S' le parecerá que ocurre en $y' = Y/2$. El tiempo T_0 que invierte A en el recorrido de ida y vuelta, medido en el sistema S, es, por tanto: $T_0 = Y/V_A$ y es el mismo para B en S', $T_0 = Y/V'_B$. Si se conserva el momentum en el sistema S se tiene que:

$$m_A V_A = m_B V_B$$

En S la velocidad de B tiene el valor: $V_B = Y/T$, donde T es el tiempo que tarda B en su recorrido ida y vuelta medido en S.

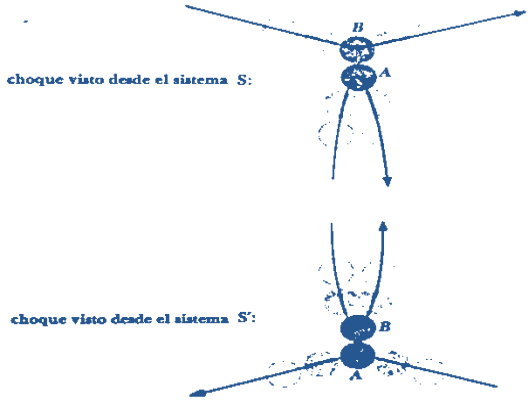


Figura I.1.11: Choque elástico visto desde S y S'.

Sin embargo, en S' el recorrido de B requiere el tiempo T_0, donde $T = T_0\gamma$. Sustituyendo T en la ecuación para la velocidad de B, se tiene que: $V_B = Y/T_0\gamma$; y como $V_A = Y/T_0$, al reemplazar estas expresiones para las velocidades en la ecuación de conservación del momento se obtiene: $m_A = m_B/\gamma$.

Según la hipótesis original, las masas de A y B eran idénticas cuando se encontraban en reposo respecto del observador. Entonces, según el resultado obtenido, las mediciones de masa, así como las de espacio y tiempo dependen de la velocidad relativa entre el observador y lo que este observa. Si se hace $m_A = m_0$ y $m_B = m$, se obtiene la conocida fórmula:

Relatividad de la masa: $$m = m_0\gamma$$ **[I.1.20]**

Ahora bien, definiendo la cantidad de movimiento como: $mv = m_0v\gamma$, la conservación del momento es válida en relatividad especial, al igual que en física clásica.

Masa y energía: Considérese la energía cinética T de un cuerpo en movimiento como el trabajo realizado para llevarle del reposo a su estado de movimiento. Es decir,

$$T = \int_0^s F ds \qquad \textbf{[I.1.21]}$$

Utilizando la forma relativista de la segunda ley de movimiento: $F = d(mv)/dt$ la expresión para la energía cinética se convierte en:

$$T = \int_0^s \frac{d(mv)}{dt} ds = \int_0^{mv} v\, d(mv) = \int_0^{mv} v\, d\left(\frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}\right) \qquad \textbf{[I.1.22]}$$

Que al integrar por partes permite obtener el resultado: $T = mc^2 - m_0c^2$.

Interpretando el término mc^2 como la energía total E de un cuerpo, se deduce que aun cuando el cuerpo se encuentre en reposo y $T = 0$, posee no obstante la energía: $E_0 = m_0c^2$.

Con estos resultados se llega la expresión para la energía total $E = E_0 + T$ de una partícula:

$$E = mc^2 \Longrightarrow E = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = \sqrt{\frac{m_0^2c^4}{1-v^2/c^2}} \Longrightarrow E^2\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m_0^2c^4 \Longrightarrow E^2 - E^2\frac{v^2}{c^2} = m_0^2c^4.$$

$\Longrightarrow E^2 - m^2c^4\frac{v^2}{c^2} = E^2 - p^2c^2 = m_0^2c^4$, de donde se obtiene finalmente, la conocida ecuación:

Energía total de una partícula: $$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}.$$ **[I.1.23]**

Ejemplo I.1.3: Supóngase que se encierra en un recipiente transparente sellado un foco de $100\ W = 100 J/s$ con su fuente de alimentación y se cuelga de una balanza muy sensible. Calcular el cambio en la masa si el foco brilla continuamente durante un año.

Solución: ya que $1\ año \cong \pi \times 10^7\ s$, en un año la energía radiada es aproximadamente $3 \times 10^9\ J$. Entonces,

$$\Delta m_0 = \frac{\Delta E_0}{c^2} = \frac{3\times10^9\ J}{(3\times10^8\ m/s)^2} \cong 3 \times 10^{-8}\ kg.$$ ■

Ejemplo I.1.4: A una distancia igual al radio de la órbita de la Tierra, $r_T = 1.5 \times 10^{11}\ m$, la radiación del Sol tiene una intensidad aproximadamente de $I_S = 1.4 \times 10^3\ W/m^2$. Encontrar la razón a la que el Sol está perdiendo masa.

Solución: Suponiendo que la radiación del Sol está distribuida uniformemente sobre una esfera de radio $r_T = 1.5 \times 10^{11}\ m$, entonces la potencia radiativa total emitida por el Sol es:

$$P_S = 4\pi(1.5 \times 10^{11}\ m)^2(1.4 \times 10^3\ W/m^2) = 4 \times 10^{26}\ W = 4 \times 10^{26}\ J/s.$$

Una pérdida de energía en reposo de $\Delta E_0 = 4 \times 10^{26}\ J$ corresponde a un cambio de masa en reposo de:

$$\Delta m_0 = \frac{\Delta E_0}{c^2} = \frac{4\times10^{26}\ J}{(3\times10^8\ m/s)^2} = 4 \times 10^9\ kg.$$ ■

Ejemplo I.1.5: Encontrar la energía total, la energía cinética y el impulso de un protón ($m_0c^2 = 938\ MeV$) que se mueve a $v/c = 0.800$.

Solución: $E = mc^2 = \frac{m_0c^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = \frac{938\ MeV}{\sqrt{1-(0.8)^2}} = 1{,}563\ MeV.$

Entonces, la energía cinética es: $T = E - m_0^2c^2 = 1{,}563\ MeV - 938\ MeV.$

El impuso está dado por: $p \equiv \frac{m_0v}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = \frac{1}{c}\frac{(m_0c^2)(v/c)}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = \frac{1}{c}\frac{(938\ MeV)(0.8)}{\sqrt{1-(0.8)^2}} = 1{,}250\ MeV/c.$ ■

PROBLEMAS: Relatividad Especial (dinámica relativista)

1. La vida media de un muón en reposo es de $2.2 \times 10^{-6}s$. La vida media de los muones observada al penetrar la atmósfera terrestre es de $6.6 \times 10^{-6}s$. Encuentre (a) la masa del muón a esta velocidad siendo su masa en reposo de $207\ m_e$. (b) Su energía cinética. (c) Su momento.

Solución: (a) $t = t_0\gamma$; donde, $\gamma = (6.6 \times 10^{-6}s)/(2.2 \times 10^{-6}s) = 3$.

De modo que: $m = m_0\gamma = 3 \times 207\ m_e = 621\ m_e$.

(b) $T = (\gamma - 1)m_0c^2 = (3-1) \times (207\ ) \times (0.510\ MeV/c^2) \times c^2 = 211.14\ MeV$.

Donde se ha tomado $m_e = 0.510\ MeV/c^2$.

(c) La energía total es: $E = mc^2 = (621\ m_e)c^2 = 621 \times 0.510\ MeV = 316.71\ MeV$;

pero $E^2 = (m_0c^2)^2 + p^2c^2 \Rightarrow p^2c^2 = E^2 - (m_0c^2)^2 = [316.71\ MeV]^2 - [(207\ ) \times (0.510\ MeV)]^2$

de modo que: $p^2c^2 = 100{,}305.224 \times [\ MeV]^2 - 11{,}145.029 \times [MeV]^2 = 89{,}160.195 \times [MeV]^2$.

Así que: $p = \frac{\sqrt{89{,}160.195 \times [MeV]^2}}{c} = 298.597\ MeV/c$. ■

2. Calcule la energía que puede obtenerse de la completa aniquilación de $1g$ de masa.

Solución: $E = m_0c^2 = (1 \times 10^{-3}kg) \times (3 \times 10^8\ m\ s^{-1})^2 = 9 \times 10^{13}\ J$. ■

3. Considerando que $T = mc^2 - m_0c^2$ y $p = mv$ deduzca la expresión $E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}$ para la energía total de una partícula.

Solución: $p = mv = \frac{m_0v}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$; despejando v de esta expresión se tiene:

$$p\sqrt{1 - v^2/c^2} = m_0v \Rightarrow p^2(1 - v^2/c^2) = m_0^2v^2 \Rightarrow p^2c^2 - v^2p^2 = m_0^2v^2c^2 \Rightarrow p^2c^2 = m_0^2v^2c^2\ + v^2p^2$$

$$\Rightarrow p^2c^2\ = v^2(m_0^2c^2\ + p^2) \Rightarrow v^2 = p^2c^2/(m_0^2c^2\ + p^2)\ \therefore v = pc/\sqrt{m_0^2c^2\ + p^2}.$$

Por el otro lado, $T = mc^2 - m_0c^2$, o bien, $T + m_0c^2 = mc^2$ que puede escribirse como: $E = mc^2$.

$\Rightarrow E = m_0c^2/\sqrt{1 - v^2/c^2} \Rightarrow E^2 = (m_0c^2)^2/(1 - v^2/c^2)$, reemplazando el valor para v encontrado se tiene:

$$E^2 = \frac{(m_0c^2)^2}{\left(1-\frac{p^2c^2/(m_0^2c^2+p^2)}{c^2}\right)} = \frac{(m_0c^2)^2}{\left(1-\frac{p^2}{m_0^2c^2+p^2}\right)} = \frac{(m_0c^2)^2}{\left(\frac{m_0^2c^2+p^2-p^2}{m_0^2c^2+p^2}\right)} = \frac{(m_0c^2)^2(m_0^2c^2+p^2)}{m_0^2c^2} = (m_0c^2)^2 + \frac{(m_0c^2)^2p^2}{m_0^2c^2}.$$

Y entonces, $E^2 = (m_0c^2)^2 + p^2c^2$. ■

4. ¿Cuál es la velocidad de un protón que es acelerado a $1\ GeV$?

Solución: $T = mc^2 - m_0c^2 \Rightarrow 1GeV = mc^2 - m_0c^2 = m_0c^2\gamma - m_0c^2 \Rightarrow 1\ GeV = m_0c^2(\gamma - 1)$

$$\Rightarrow \gamma = \frac{1000\ eV}{978.272\ MeV} + 1 = 2.022 \Rightarrow \sqrt{1 - v^2/c^2} = 0.4945 \Rightarrow v^2 = [1 - (0.4945)^2]c^2 \Rightarrow v = 0.8991\ c.$$ ■

II. PARTÍCULAS Y ONDAS

II.1 LEYES DE RADIACIÓN TÉRMICA

Definición de cuerpo negro y características espectrales de su radiación:

Se llama *radiación térmica*, a la radiación emitida por un cuerpo como consecuencia de su temperatura. Todos los cuerpos emiten esta radiación a su derredor, y la absorben de él. Si, en un principio, el cuerpo está más caliente que su alrededor, se enfriará, ya que la rapidez con que emite energía excederá la rapidez con que la absorbe. Cuando se alcanza el equilibrio térmico la rapidez de emisión y la de absorción de energía serán iguales. La materia en un estado condensado (es decir, sólido o líquido) emite un espectro de radiación continuo. En términos generales, la forma detallada del espectro de radiación térmica emitida por un cuerpo caliente depende de la composición del mismo. Sin embargo, experimentalmente se encuentra que solo hay una clase de cuerpos que emiten espectros térmicos de características universales. Estos son llamados *cuerpos negros*. Todos los cuerpos negros a la misma temperatura emiten radiación térmica con el mismo espectro.

Un cuerpo negro es un objeto teórico o ideal que absorbe toda la luz y toda la *energía radiante* que incide sobre él. Nada de la radiación incidente se refleja o pasa a través del cuerpo negro.

Cuando la radiación encerrada dentro de una cavidad alcanza el equilibrio térmico con los átomos de las paredes, la cantidad de energía que emiten los átomos, por unidad de tiempo, es igual a la que absorben. En consecuencia, la densidad de energía del campo electromagnético existente en la cavidad es constante.

A cada frecuencia corresponde una densidad de energía que depende solamente de la temperatura de las paredes y es independiente del material del que están hechas.

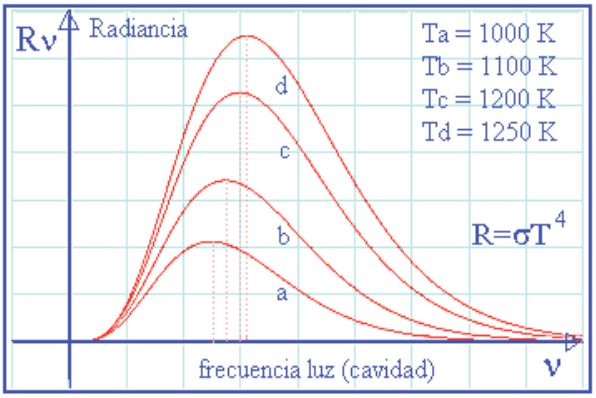


Figura II.1.1: Radiancia espectral de un cuerpo negro radiante como función de la frecuencia de radiación.

Distribución espectral: La radiación de un cuerpo negro se expresa como $R_T(\nu)$, llamada *radiancia espectral*, definida tal que $R_T(\nu)d\nu$ es la energía emitida en forma de radiación con frecuencia en el intervalo $[\nu, \nu + d\nu]$ de un área unitaria de la superficie a temperatura absoluta T y por unidad de tiempo. **[Figura II.1.1]**.

La energía o potencia total radiada por un cuerpo negro, en todas las frecuencias a una temperatura dada es:

$$R_T = \int_0^\infty R_T(\nu)d\nu \ [W/m^2] \qquad \textbf{[II.1.1]}$$

Intensidad espectral: También llamada irradiancia, es la potencia radiante para una determinada frecuencia de onda, así: $I_T(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left[e^{h\nu/kT} - 1\right]^{-1}[J \cdot m^{-2} \cdot Sr^{-1}]$, donde $I_T(\nu) \cdot d\nu$ es la cantidad de energía por unidad de área, unidad de tiempo y unidad de ángulo sólido emitida en el rango de frecuencias entre $[\nu, \nu + d\nu]$.

Se llama poder emisivo de un cuerpo $R_T(\nu)d\nu$ a la cantidad de energía radiante emitida por la unidad de superficie y tiempo entre las frecuencias $[\nu, \nu + d\nu]$. Así, $R_T(\nu)d\nu = \frac{4\pi}{c} \cdot I_T(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\left[e^{h\nu/kT} - 1\right]^{-1}d\nu$.

La densidad espectral: Es la distribución de la potencia radiada o la energía sobre las distintas frecuencias de las que está formada, es decir, su espectro: $\rho_T(\nu) = \frac{dR_T(\nu)}{d\nu} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\left[e^{h\nu/kT} - 1\right]^{-1}$ $[J \cdot s \cdot m^{-3}]$.

Radiación electromagnética:

Fuerza de Lorentz: Cuando una carga se mueve en el campo electromagnético producido por otras cargas experimenta la fuerza: $\boldsymbol{F} = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B})$.

La energía por unidad de volumen de un campo electromagnético en el vacío es:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2}\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0}B^2 \qquad \textbf{[II.1.2]}$$

La variación de un campo electromagnético en el tiempo da lugar a ondas que electromagnéticas que se propagan en el tiempo con velocidad: $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0} \approx 3 \times 10^8\ m/s$. Una carga en movimiento rectilíneo uniforme no irradia energía electromagnética porque la energía total de su campo electromagnético permanece constante, *pero una carga acelerada irradia energía electromagnética.* La rapidez con que una carga q a velocidad $\boldsymbol{v} \ll c$ y aceleración $\boldsymbol{a}$ emite energía radiante es (según la fórmula de Larmor):

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \frac{q^2a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \qquad \textbf{[II.1.3]}$$

Radiación de frenado, *bremsstrahlung*: Se produce cuando una partícula cargada, un electrón o un protón, incide en un blanco y se detiene. Es el principal mecanismo de producción de radiación en los tubos de rayos X.

Ejemplo II.1.1: Rapidez con que un dipolo eléctrico oscilante irradia energía.

Solución: se considera una carga q moviéndose a lo largo del eje Z de modo tal que en todo instante su posición está dada por $z = z_0 \cos\omega t$. Lo cual corresponde a un movimiento oscilatorio de amplitud z_0 y frecuencia angular ω. La aceleración de la partícula es $a = -\omega^2 z$. Sustituyendo en **[II.1.3]**, se tiene:

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \frac{q^2z^2\omega^4}{6\pi\epsilon_0 c^3} \qquad \textbf{[II.1.4]}$$

Para obtener la rapidez promedio de la radiación de energía, recordamos que $\overline{z^2} = \frac{1}{2}z_0^2 = z_0^2\frac{1}{\pi}\int_0^\pi \cos^2\omega t\, dt$, donde $\int_0^\pi cos^2\, u\, du = \frac{1}{2}u + \frac{1}{4}sin\, 2u$ y $\int_0^\pi sin^2\, u\, du = \frac{1}{2}u - \frac{1}{4}sin\, 2u$, así que:

$$\overline{\left(\frac{d\mathcal{E}}{dt}\right)} = \frac{q^2z_0^2\omega^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} \qquad \textbf{[II.1.5]}$$

Así pues, el campo electromagnético oscila con la misma frecuencia que el dipolo. ■

Radiación de cuerpo negro:

Hipótesis de Planck: cada oscilador puede absorber o emitir energía de radiación en una cantidad proporcional (constante de Planck) a su frecuencia ν; es decir que la energía de los osciladores atómicos esta cuantizada.

$$E_n = nh\nu;\ n \in \mathbb{N} \qquad \textbf{[II.1.6]}$$

La energía de un oscilador es proporcional al cuadrado de la amplitud. Aplicando consideraciones estadísticas junto con la ecuación **[II.1.6]** Planck obtuvo la expresión para la densidad de energía de radiación de cuerpo negro, la ecuación conocida como *Ley de radiación de Planck*:

$$R_T(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1} \qquad \textbf{[II.1.7]}$$

Donde $k \equiv k_B = 1.3806 \times 10^{-23} J/K$, es la constante de Boltzmann y $h = 6.6256 \times 10^{-34} J \cdot s$.

Ejemplo II.1.2: Expresar la densidad de energía monocromática de la radiación de c. n. en función de la longitud de onda.

Solución: Se tiene que $R_T(\lambda)d\lambda = -R_T(\nu)d\nu$, ya que $\nu = c/\lambda$.

Entonces $d\nu/d\lambda = -c/\lambda^2$ y $R_T(\lambda) = -R_T(\nu)d\nu/d\lambda$, así que $R_T(\lambda) = -R_T(\nu)c/\lambda^2$.

$$\therefore \qquad R_T(\lambda) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda kT}-1}. \qquad \blacksquare \qquad \textbf{[II.1.8]}$$

Ejemplo II.1.3: Encontrar la longitud de onda para la cual la densidad de energía monocromática de radiación de cuerpo negro es máxima a una temperatura dada.

Solución: Usando **[II.1.8]** y para simplificar haciendo $x = hc/\lambda kT$ se puede escribir: $\rho_T(\lambda) = \frac{8\pi k^5 T^5}{h^4 c^4}\frac{x^5}{e^x-1}$, que al derivar con respecto a x e igualar a cero permite obtener la ecuación trascendente $e^{-x} + \frac{1}{2}x - 1 = 0$. Por aproximaciones sucesivas se obtiene el valor $x = 4.965$; de modo que $\lambda T = hc/k \cdot 4.965$, que se conoce como *Ley de desplazamiento de Wien* y establece que $\lambda_1 T_1 = \lambda_2 T_2 = \cdots = \lambda_n T_n = b$; es decir que, a medida que la temperatura aumenta, la energía se desplaza hacia longitudes de onda más corta. Donde la constante $b = 2.897 \times 10^{-3}\ m \cdot K$ y se conoce como la *constante de Wien*. $\blacksquare$

Ejemplo II.1.4: Obtener la energía total de la radiación de un cuerpo negro en función de la temperatura.

Solución:
$$R_T = \int_0^\infty R_T(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\int_0^\infty \frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT}-1}d\nu \qquad \textbf{[II.1.9]}$$

Introduciendo la variable $x = h\nu/kT$; se tiene que $d\nu = (kT/h)dx$ y

$$R_T = \frac{8\pi h}{c^3}\left(\frac{kT}{h}\right)^4 \int_0^\infty \frac{x^4}{e^x-1}dx \qquad \textbf{[II.1.10]}$$

El valor de la integral es 6.4938 por lo que: $R_T \triangleq \int_0^\infty R_T(\nu)d\nu = aT^4$ **[II.1.11]**

Donde $a = 7.564 \times 10^{-16}\ J\ m^{-3}\ K^{-4}$. La ecuación **[II.1.11]** se conoce como *Ley de Stefan-Boltzmann*. Se puede demostrar que la energía emitida por un cuerpo negro, por unidad de área y por unidad de tiempo, llamada *potencia emisiva de radiación* está dada por $E = \sigma T^4$, donde $\sigma = \frac{1}{4}ca = 5.669 \times 10^{-8}\ W\ m^{-2}\ K^{-4}$, es la constante de *Stefan-Boltzmann*. $\blacksquare$

Ejemplo II.1.5: (a) Obtener la ganancia de energía de un electrón que se acelera a través de una diferencia de potencial de $1\ V$. (b) suponiendo que parte del reposo, calcular su velocidad final.

Solución: (a) La carga del electrón es $1.602 \times 10^{-19}\ C$ y como $1\ V = V_A - V_B = \frac{W_{AB}}{q} = \int_A^B \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{l} = E \cdot d$ $[J/C]$, entonces la energía obtenida por el electrón es $1.602 \times 10^{-19}\ C \times \frac{J}{C} = 1.602 \times 10^{-19}\ J = 1\ eV$.

(b) Entonces, $1.602 \times 10^{-19}\ J = \frac{1}{2}m_e v^2$, de donde $v = \sqrt{\frac{2\times 1.602\times 10^{-19}}{9.11\times 10^{-31}}}\frac{m}{s} = 593{,}044.2\frac{m}{s}$. $\blacksquare$

Ejemplo II.1.6: Una fuente gaseosa emite luz de longitud de onda de $5 \times 10^{-7}\ m$. Suponer que cada molécula es un oscilador de carga e y amplitud $10^{-10}\ m$. (a) Calcular la rapidez media de radiación de energía por molécula. (b) Si la rapidez total de radiación de energía de la fuente es de $1\ W$, ¿cuántas moléculas están emitiendo?

Solución: (a) Usando la fórmula **[II.1.5]** y tomando $q = e$, $z_0 = 10^{-10}\ m$ y $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda} = \frac{2\pi c}{5\times10^{-7}\ m}$.

Entonces, $\overline{\left(\frac{d\mathcal{E}}{dt}\right)} = \frac{q^2 z_0^2 \omega^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} = \frac{(1.602\times10^{-19}C)^2(10^{-10}m)^2\left(\frac{2\pi c}{5\times10^{-7}\ m}\right)^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} = 5.751\ \times 10^{-12} J/s;$

Donde $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}\frac{C^2}{Nm^2}$ y $c = 3 \times 10^8\ m/s$.

(b) El número de moléculas se obtiene de la siguiente manera: $1W/(5.751 \times 10^{-12}\ J/s) = 1.738 \times 10^{-11}$. ■

Ejemplo II.1.7: Se estima el valor de $\overline{(dE/dt)}$ para un protón de un núcleo. Se supone que $z_0 = 10^{-15}\ m$ y $\omega = 5 \times 10^{20}\ s^{-1}$ para rayos gamma de baja energía.

Solución: Usando **[1.5]** y sustituyendo $q = +1.602\ \times 10^{-19}C$, $z_0 = 10^{-15}\ m$ y $\omega = 5 \times 10^{20}\ s^{-1}$ se obtiene:

$$\overline{\left(\frac{d\mathcal{E}}{dt}\right)} = \frac{q^2 z_0^2 \omega^4}{12\pi\epsilon_0 c^3} = \frac{(1.602\ \times 10^{-19}C)^2(10^{-15}\ m)^2(5 \times 10^{20}\ s^{-1})^4}{12\pi\left(8.854 \times 10^{-12}\frac{C^2}{Nm^2}\right)(3 \times 10^8\ m/s)^3} = 0.1779\ J/s$$

Donde $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}\frac{C^2}{Nm^2}$ y $c = 3 \times 10^8\ m/s$. ■

Ley de Stefan-Boltzmann: La energía o potencia total radiada, R_T, aumenta rápidamente con la temperatura.

Un cuerpo negro emite radiación térmica con una potencia emisiva superficial proporcional a la cuarta potencia de su temperatura:

$$R_T = \int_0^\infty R_T(\nu)d\nu = \int_0^\infty f(\lambda,T)d\lambda = \sigma T^4 \qquad \textbf{[II.1.12]}$$

Donde $\sigma = 5.67 \times 10^{-8}\ W/m^2K^4$ y se conoce como *constante de Stefan-Boltzmann.*

Emisividad: La potencia emisiva de una superficie es menor que el de un cuerpo negro a la misma temperatura: $R_T = \varepsilon\sigma T^4$. Donde $\varepsilon\ \epsilon\ [0,1]$ es la emisividad, que es la propiedad radiativa de la superficie.

Ley de Kirchhoff: Si un cuerpo (o superficie) está en equilibrio termodinámico con su entorno, su emisividad ε es igual a su absorbancia α, así que $\varepsilon/\alpha\ = 1$. Para un cuerpo negro $\alpha = 1$.

Ejemplo II.1.8: Supóngase dos cuerpos opacos separados por una distancia grande y colgados de hilos finos en una cámara vacía cuyas paredes se mantienen a temperatura constante. Los cuerpos y las paredes intercambian calor solo por medio de radiación. De modo que $\varepsilon_1/\alpha_1\ = 1 = \varepsilon_2/\alpha_2$. Si uno de los cuerpos, por ejemplo, el 2, es un cuerpo negro entonces $\alpha_2 > \alpha_1$, ya que un cuerpo negro es más absorbente que uno que no lo es. Así que, también $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$. De modo que un cuerpo que es más absorbente también es mejor emisor. ■

Ley de desplazamiento de Wien: También se muestra que el espectro se desplaza hacia frecuencias mayores a medida que T aumenta. Este resultado se conoce como *ley de desplazamiento de Wien*: $\nu_{max} \propto T$, donde ν_{max} es la frecuencia para la cual $R_T(\nu)$ alcanza su valor máximo para una temperatura T particular.

En términos de la longitud de onda, ya que $\lambda = c/\nu$, especifica una relación inversa entre la longitud de onda que se produce en el pico de emisión de un cuerpo negro y su temperatura: $f(\lambda,T) = \vartheta(\lambda,T)/\lambda^5$. Así que, cuanta mayor sea la temperatura menor es la longitud de onda asociada: $\lambda_{max} \cdot T = 2.897 \times 10^{-3} m \cdot K$.

Ejemplo II.1.9: La ley de Wien permite obtener la temperatura de las estrellas si se supone que su superficie se comporta como cuerpo negro, midiendo λ_{max} . Para el Sol $\lambda_{max} = 5{,}100$ Å, mientras que para la Estrella Polar $\lambda_{max} = 3{,}500$ Å. Entonces, para el Sol, $T_\odot = 2.897 \times 10^{-3} m \cdot K / 5{,}100 \times 10^{-10} m \approx 5{,}700 K$, y para la Estrella Polar, $T_\star = 2.897 \times 10^{-3} m \cdot K / 3{,}500 \times 10^{-10} m \approx 8{,}300 K$.

La radiación solar está a una temperatura tal que la mayor parte de su radiación se encuentra en la región visible del espectro. Para obtener la potencia radiada por cm^2 de la superficie estelar correspondiente, con los datos de temperatura obtenidos, se puede usar la ley de Stefan-Boltzmann **[II.1.12]** de la siguiente manera:

$$E_\odot = \sigma T^4 = (5.67 \times 10^{-8}\, W/m^2K^4) \times (5{,}700\, K)^4 = 5.985 \times 10^7\, W/m^2 \approx 6{,}000\, W/cm^2.$$

$$E_\star = \sigma T^4 = (5.67 \times 10^{-8}\, W/m^2K^4) \times (8{,}300\, K)^4 = 2.690 \times 10^8\, W/m^2 \approx 27{,}000\, W/cm^2.$$ ■

Teoría de la cavidad radiante:

Considérese una cavidad cúbica de longitud a por lado con paredes metálicas que se calienta uniformemente a una temperatura T. Las paredes emiten radiación electromagnética en forma de ondas estacionarias en el intervalo térmico de frecuencias, con nodos en las superficies metálicas. Ya que las componentes en las tres direcciones perpendiculares deben ser independientes, se puede tratar primeramente el caso unidimensional para luego extenderlo a tres dimensiones.

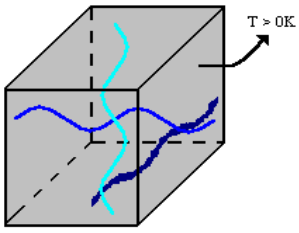


Figura II.1.2: Cavidad de paredes metálicas llena con radiación electromagnética.

El campo eléctrico para una onda estacionaria unidimensional puede describirse matemáticamente por la función: $E(x,t) = E_{0x} \sin(2\pi x/\lambda_x) \sin(2\pi\nu t)$. Como la onda es estacionaria, la amplitud es cero para: $2x/\lambda_x = n_x \in \mathbb{N}$, en $x = 0$ y $x = a$.

Como $\nu = c/\lambda$ donde $2a/\lambda = n$, las frecuencias permitidas serán entonces: $\nu = cn/2a$. El número de valores permitidos para las frecuencias en el intervalo $[\nu, \nu + d\nu]$ para un valor particular de n se denota $N_x(\nu)d\nu$ y es proporcional a $d\nu$, sin depender de ν. Debe ser claro que $N_x(\nu)d\nu = (2a/c)d\nu$, pero debe multiplicarse por 2 ya que para cada frecuencia existen dos ondas electromagnéticas correspondientes a los dos estados de polarización posibles. $\therefore N_x(\nu)d\nu = (4a/c)d\nu$.

Las expresiones para las magnitudes de los campos eléctricos de las tres componentes en los tres ejes son:

$$\begin{aligned} E(x,t) &= E_{0x} \sin(2\pi x/\lambda) \sin(2\pi\nu t), \\ E(y,t) &= E_{0y} \sin(2\pi y/\lambda) \sin(2\pi\nu t), \\ E(z,t) &= E_{0z} \sin(2\pi z/\lambda) \sin(2\pi\nu t). \end{aligned} \qquad \textbf{[II.1.13]}$$

Las tres ondas estacionarias oscilan con frecuencia ν. Sumando (trigonométricamente) las tres componentes:

$$(2a/\lambda)^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \quad \Rightarrow \quad \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2a}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \qquad \textbf{[II.1.14]}$$

Donde n_x, n_y y n_z toman todos los valores enteros posibles.

El número de frecuencias permitidas en el intervalo $[\nu, \nu + d\nu]$ puede expresarse como el número de puntos nodales contenidos entre cascarones concéntricos de radios en el intervalo $[r, r + dr]$, con $r = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$, se tiene que $r = 2a\nu/c$. Como $N(r)dr = (1/8)4\pi r^2 dr$, es decir, el volumen comprendido entre los cascarones; al igualarlo con $N(\nu)d\nu$, evaluando $r^2 dr$ con $r = 2a\nu/c$ y multiplicando por 2, se obtiene:

$$N(\nu)d\nu = \pi \left(\frac{2a}{c}\right)^3 \nu^2 d\nu \qquad \textbf{[II.1.15]}$$

Cálculo de la densidad de modos electromagnéticos en la cavidad de cuerpo negro:

Los campos electromagnéticos en una caja aislada deben cumplir la ecuación de Maxwell: $\nabla^2 \boldsymbol{E} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2}$.

Con las condiciones de contorno: $\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 0$, fuera de las paredes y $\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{n}_\perp = 0$, en las paredes.

La solución que cumple con todas las condiciones de contorno es: $\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{k} = 0$, es decir, los campos eléctricos son perpendiculares al momento $\boldsymbol{k}$ de la onda electromagnética y $k_i = \frac{n_i \pi}{a}, i = x, y, z$.

Sustituyendo en la solución se obtiene la condición: $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$.

Combinando las dos últimas ecuaciones y tomando $\omega = 2\pi\nu$, se obtiene: $\nu = \frac{c}{2a}\left[n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right]^{1/2}$.

Entonces, se define el número de estados (n_x, n_y, n_z) que tienen valores en el primer octante de una esfera de radio $r = 2a\nu/c$ como: $\bar{N}(\nu) = \frac{4}{3}\pi r^3 \frac{2}{8} = \frac{8\pi a^3 \nu^3}{3c^3}$, dado que hay dos estados de polarización.

El número de estados: $N(\nu) = \frac{d\bar{N}}{d\nu} = \frac{8\pi a^3}{c^3}\nu^2$.

Ley de la equipartición de la energía: Para un sistema de moléculas de un gas, en equilibrio térmico a una temperatura T, la energía cinética promedio de una molécula por grado de libertad es $kT/2$, donde $k = 1.3806 \times 10^{-23} J/K$ es la constante de Boltzmann.

Para el caso de la cavidad radiante, se puede aplicar la ley de la equipartición de la energía a los entes contenidos; es decir, a las ondas electromagnéticas, con la consideración de que cada onda tendrá como energía total el doble de su energía cinética (ya que $\bar{K} = \bar{U}$), de modo que cada onda estacionaria en la cavidad tiene una energía total promedio $\bar{\mathcal{E}} = kT$, que es independiente de su frecuencia.

Ley de Rayleigh-Jeans (catástrofe ultravioleta): La energía por unidad de volumen en el intervalo $[\nu, \nu + d\nu]$ del espectro de cuerpo negro de una cavidad radiante a temperatura T, es el producto de la energía promedio $kT = \bar{K}_T + \bar{U}$ de cada átomo oscilante por el número de ondas estacionarias en el intervalo por unidad de volumen:

$$\rho_T(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3}d\nu \qquad \textbf{[II.1.16]}$$

Esta ley, pretendía describir la distribución espectral de la radiación electromagnética de un cuerpo negro a una temperatura dada; sin embargo, predecía una producción de energía que tendía al infinito al aumentar la frecuencia. Esta idea no se soportaba por los experimentos y la falla se conoció como la *catástrofe ultravioleta*.

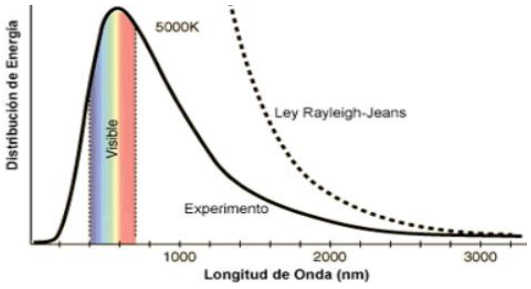


Figura II.1.3: La Catástrofe Ultravioleta.

Ley de Planck (significado físico de la cuantización de la energía):

Densidad de energía radiada por un cuerpo negro: $\rho_T(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\left[e^{h\nu/kT}-1\right]^{-1}d\nu$. La energía de los osciladores de frecuencia ν está cuantizada y sólo puede tener los valores $E = nh\nu$, $n \in \mathbb{N}$.

A partir de la fórmula de Planck, se pueden derivar la ley de Stefan (integrando en todo el espectro) y la ley de desplazamiento de Wien (haciendo $d\rho/d\lambda = 0$), si se les ajusta a resultados experimentales, se pueden determinar valores para las constantes h y k.

Ejemplo II.1.10: Se deriva la expresión de Planck para la energía y el espectro de cuerpo negro:

$$R_T(\nu) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} EP(E)}{\sum_{n=0}^{\infty} P(E)} \qquad \textbf{[II.1.17]}$$

Donde $P(E)$ es la probabilidad de encontrar un ente dado de un sistema con energía en el intervalo $[E, E+dE]$. Debido al postulado de Planck la energía se convierte en una variable discreta que solo toma valores $E = nh\nu$, con $n \in \mathbb{N}$. Evaluando la distribución de Boltzmann $P(E) = e^{-E/kT}/kT$, se tiene que:

$$R_T(\nu) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{nh\nu}{kT} e^{-nh\nu/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{kT} e^{-nh\nu/kT}} = kT \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\alpha e^{-n\alpha}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}} = -\alpha kT \frac{d}{d\alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} = -h\nu \frac{d}{d\alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} \qquad \textbf{[II.1.18]}$$

Donde $\alpha = h\nu/kT$. Ahora bien,

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} = 1 + e^{-\alpha} + e^{-2\alpha} + \cdots + e^{-n\alpha} = 1 + x + x^2 + \cdots + x^n = (1-x)^{-1} \qquad \textbf{[II.1.19]}$$

Para $x = e^{-\alpha}$. De modo que:

$$R_T(\nu) = -h\nu \frac{d}{d\alpha} \ln(1-e^{-\alpha})^{-1} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1} \qquad \textbf{[II.1.20]}$$

Multiplicando lo anterior por **[II.1.15]** el número $N(\nu)d\nu$ de ondas que tienen frecuencia ν se obtiene el espectro de Planck del cuerpo negro. ■

Energía del Punto Cero: Es la energía más baja que un sistema físico mecano-cuántico puede poseer, y es la energía del estado fundamental del sistema.

Estadística de Maxwell-Boltzmann vs. Estadística de Bose-Einstein:

Para cada sistema termodinámico, la distribución de Maxwell-Boltzmann es la aplicación del colectivo canónico de la mecánica estadística, bajo el supuesto no-cuántico de que los números de ocupación de cada estado disponible son pequeños comparados con el número máximo estados de ocupación. Esta función es una densidad de distribución cuya expresión es: $\frac{N_i}{N} = \frac{g_i e^{(-\epsilon_i)/kT}}{Z}$. Es decir el número total de partículas en un estado, N_i entre el número total de partículas; con energía ϵ_i, degeneración g_i y función de partición: $Z = \sum_i g_i e^{(-\epsilon_i)/kT}$. En una forma simple se puede escribir como: $f_{MB}(E) = A^{-1}e^{(-E)/kT}$.

Para un sistema de partículas cuánticas, la hipótesis de que N_i sea substancialmente menor que g_i para los estados diferentes del fundamental en general no se cumplirá y es necesario acudir a la estadística de Bose-Einstein (-) o de Fermi-Dirac (+): $\frac{N_i}{N} = \frac{g_i}{e^{(\epsilon_i-\mu)/kT} \pm 1}$. Asumiendo que el valor mínimo de ϵ_i es bastante pequeño, se puede verificar que la condición en la cual la distribución de Maxwell-Boltzmann es válida es cuando se cumple que: $e^{-\mu/kT} \gg 1$.

PROBLEMAS: Leyes de Radiación Térmica

1. ¿A qué longitud de onda, una cavidad a 6000 K radiará más por unidad de longitud de onda?

Solución: para encontrar la longitud de onda máxima basta usar la Ley de Desplazamiento de Wien: $\lambda_{max} \cdot T = 2.8976 \times 10^{-3} m \cdot K$. De modo que:

$$\lambda_{max} = 2.897 \times 10^{-3} m \cdot K / 6000\ K = 4{,}830\ \text{Å}$$ ■

2. Un alambre de longitud de 1 m y de radio de 1 mm se calienta con una corriente eléctrica para producir 1 kW de potencia radiante, si se considera el alambre como un cuerpo negro y se desprecian los efectos de borde, calcule la temperatura del alambre.

Solución: La potencia eléctrica es igual a la potencia radiada.

$W = \sigma T^4 A$,

$A = 2\pi r l = 2\pi \times 10^{-3}\ m\ \times 1\ m = 6.283 \times 10^{-3} m^2$

$$T = \left[\frac{W}{\sigma A}\right]^{1/4} = \left[\frac{1{,}000\ W}{(5.67\times10^{-8}\ W/m^2K^4)(6.283\times10^{-3}m^2)}\right]^{1/4} = 1{,}294\ K$$ ■

3. Cuando el Sol está en el Cenit, la energía térmica incidente en la Tierra es $S = 1.4\ \text{kW/m}^2$. Considerando al Sol como un cuerpo negro de radio $R = 7 \times 10^5$ km, que se encuentra en promedio a una distancia $r = 1.5\ \times 10^8$ km de la Tierra, muestre que la intensidad total de la radiación emitida por el Sol es de $6.4\ \times 10^7 \text{W/m}^2$ y estime la temperatura solar.

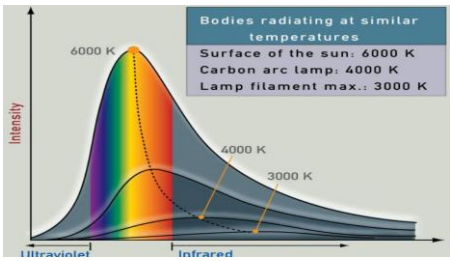


Figura II.1.4: Curva de radiación solar.

Solución: La constante solar $S_\odot$ es la energía recibida en 1 m^2 de la superficie terrestre por segundo:

$$S_\odot = \sigma T^4 \frac{4\pi R^2}{4\pi r^2} \Rightarrow \sigma T^4 = S\frac{r^2}{R^2} = 6.43\ \times 10^7 \text{W/m}^2\ \Rightarrow\ T = \left(\frac{6.43\times10^7 \text{W/m}^2}{5.67\times10^{-8}\ W/m^2K^4}\right)^{1/4} = 5{,}800\ K$$ ■

4. Suponiendo que la temperatura superficial del Sol es de 5,700 K, utilice la ley de Stefan, $R_T = \sigma T^4$, para determinar la masa en reposo que se pierde por segundo en la radiación del Sol. Tome el diámetro del Sol como $1.4 \times 10^9\ m$.

Solución: $E_\odot = R_T = \left(5.669 \times 10^{-8} \frac{W}{m^2K^4}\right)(5{,}700\ K)^4 = 5.9 \times 10^7\ W/m^2$.

$A_\odot = 4\pi r^2 = 4\pi(7.0 \times 10^8\ m)^2 = 6.157 \times 10^{18}\ m^2$.

$R_T = E_\odot \times\ A_\odot = 3.632 \times 10^{26}\ W \Rightarrow E = Mc^2 \Rightarrow M = \frac{R_T}{c^2} = 4.036\ \times 10^9\ kg$. ■

5. La presión en el interior del Sol se estima del orden de los 400 millones de atmósferas. Estime la temperatura correspondiente a esa presión considerando que es producto de la radiación.

Solución: La densidad de energía u y la presión p están relacionadas por: $p = u/3$, Como, $u = 4\sigma T^4/c$,

eliminando u se tiene: $T = \left(\frac{3cp}{4\sigma}\right)^{1/4} = \left(\frac{3\times3\times10^{-8}\frac{m}{s}\times4\times10^{-8}\times\ 1.013\times10^5\frac{N}{m^2}}{4\times5.67\times10^{-8}\ W/m^2K^4}\right)^{1/4} = 2 \times 10^7 K$. ■

6. Si u es la densidad de energía de radiación, muestre que la presión de radiación está dada por $P_{rad} = u/3$.

Solución: Usando la analogía entre la radiación (gas de fotones) y un gas de moléculas, los fotones se mueven en una cavidad de manera aleatoria en todas direcciones rebotando elásticamente en las paredes de la cavidad. La presión ejercida por un gas de fotones ideales es:

$p = \frac{1}{3}\rho < v^2 >$, donde ρ es la densidad de masa, en el caso del gas de fotones, la velocidad de todos los fotones es c. Usando la relación de Einstein se tiene que: $u = \rho c^2$ entonces $P_{rad} = \frac{1}{3}\rho c^2 = \frac{u}{3}$. ■

7. Una cavidad radiante tiene su máxima radiancia espectral a una longitud de onda de $1.0\,\mu m$ en la región infrarroja del espectro. La temperatura del cuerpo se incrementa de modo que la intensidad radiante del cuerpo se duplique. (a) ¿Cuál es la nueva temperatura? (b) ¿A que longitud de onda la radiancia espectral tiene su máximo? (La constante de Wien es $b = 2.897 \times 10^{-3}\ m \cdot K$).

Solución: (a) Usando el hecho de que: $\lambda_{max} T = b, \Rightarrow\ T = \frac{b}{\lambda_{max}} = \frac{2.897\times10^{-3}\ m\cdot K}{1\times10^{-6}\ m} = 2{,}897\ K$

Así que, $\frac{P_2}{P_1} = \frac{T_2^4}{T_1^4} = 2, \Rightarrow\ T_2 = T_1 \times 2^{1/4} = 2{,}897\ K \times 1.189 = 3{,}445\ K.$

(b) La longitud de onda de la radiación con máxima intensidad es: $\lambda_{max} = \frac{2.897\times10^{-3}\ m\cdot K}{3{,}445\ K} = 0.84\ \mu m$ ■

8. La fórmula de Planck para la radiación de cuerpo negro es:

$$R_T(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}\,d\lambda$$

(a) Mostrar que para grandes longitudes de onda y altas temperaturas se reduce a la ley de Rayleigh-Jeans.

(b) Mostrar que para longitudes de onda cortas se reduce a la ley de distribución de Wien.

Solución: (a) Para grandes longitudes de onda y altas temperaturas se tiene que $hc/\lambda kT \ll 1$ de modo que se puede expandir la exponencial y retener solo los primeros dos términos:

$$R_T(\lambda)d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5[(1 + hc/\lambda kT + \cdots) - 1]}\,d\lambda = \frac{8\pi kT}{\lambda^4}\,d\lambda$$

Escribiendo $\lambda = c/v$; $d\lambda = -\frac{c}{v^2}dv$; que al sustituir nos da: $R_T(\lambda)d\lambda = -\frac{8\pi kTv^2}{c^3}dv \Rightarrow R_T(v) = \frac{8\pi kTv^2}{c^3}$.

(b) Si en cambio $hc/\lambda kT \gg 1 \Rightarrow$ se puede despreciar el 1 en el denominador: $u_\lambda d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5 e^{hc/\lambda kT}}\,d\lambda$

La dependencia con la constante de Planck imposibilita llegar a esta expresión con métodos clásicos. ■

9. El universo emite radiación de cuerpo negro correspondiente a una temperatura de equilibrio cercana a $3\ K$. Calcule la energía de un cuanto de luz de longitud de onda a esa temperatura.

Solución: Considerando que: : $\lambda_{max} T = b$, entonces $\lambda_{max} = \frac{b}{T} = \frac{2.897\times10^{-3}\ m\cdot K}{3\ K} \approx\ 1mm.$

Así que: $E = \frac{hc}{\lambda_{max}} = \frac{(4.135\times10^{-15}\ eV\cdot s)\times(3\times10^{8}\ m/s)}{0.965\times10^{-3}\ m} = 1.284 \times 10^{-3}\ eV.$ ■

II.2 EFECTO FOTOELÉCTRICO

Emisión fotoeléctrica: Es el proceso que libera electrones de un material por la acción de la radiación (luz visible, infrarroja y ultravioleta). Los electrones emitidos se denominan fotoelectrones. La emisión electrónica aumenta cuando se hace mayor la densidad de la radiación que incide sobre la superficie de un metal, ya que hay más energía disponible para liberar electrones; pero también se observa que depende en forma característica de la frecuencia de la radiación incidente. De modo que se tiene que para cada sustancia hay una frecuencia mínima o umbral de frecuencia ν_0 de la radiación por debajo de la cual no se producen fotoelectrones sin importar la intensidad de la radiación.

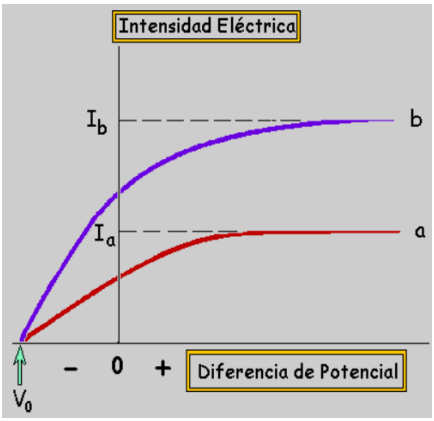


Figura II.2.1: El potencial de frenado es independiente a la intensidad de la luz, pero las corrientes de saturación I_a e I_b si son proporcionales a la intensidad.

La emisión fotoeléctrica se debe a una interacción corpuscular en la cual la energía $h\nu$ de un cuanto de energía radiante es absorbida por un electrón del metal que incrementa su energía cinética en esa cantidad, de modo que:

$$T_{max} = mv^2/2 = h\nu - h\nu_0, \;\; h = 6.626 \cdot 10^{-34}\, J \cdot s.$$

Para un metal y una frecuencia de radiación incidente dados, la cantidad de fotoelectrones emitidos es directamente proporcional a la intensidad de luz incidente.

La emisión del fotoelectrón se realiza instantáneamente ($\sim 10^{-9}\ s$), independientemente de la intensidad de la luz incidente. Este hecho se contrapone a la teoría clásica que esperaría existiese un cierto retraso entre la absorción de energía y la emisión del electrón, superior a un segundo.

Para cada metal dado, existe una cierta frecuencia mínima de radiación incidente debajo de la cual ningún fotoelectrón puede ser emitido independientemente de la intensidad de la luz incidente. Esta frecuencia se llama *frecuencia de corte* (típicamente azul o ultra violeta), también conocida como "*Frecuencia Umbral*".

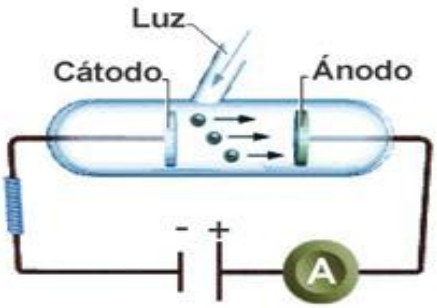


Figura II.2.2: Aparato utilizado para estudiar el efecto fotoeléctrico. El voltaje se puede variar de manera continua y mediante un interruptor, invertir de signo.

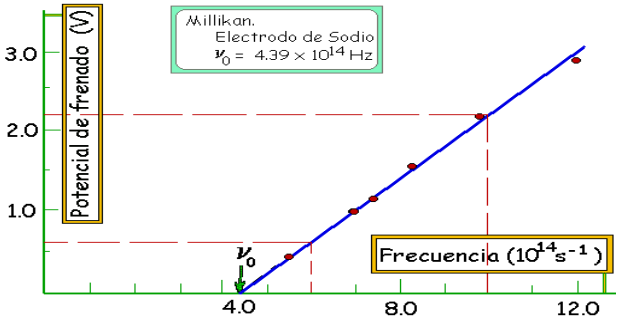


Figura II.2.3: Potencial de frenado V_0 en función de la frecuencia. Existe una frecuencia de corte ν_0 por debajo de la cual no ocurre el efecto fotoeléctrico.

Por encima de la frecuencia de corte, la energía cinética máxima del fotoelectrón emitido es independiente de la intensidad de la luz incidente, pero depende de la frecuencia de la luz incidente. Para medir la energía cinética máxima se aplica un potencial que genera un campo eléctrico que se opone al movimiento hasta alcanzar un valor V_0 para el cual la corriente fotoelectrónica se hace cero. A este valor se le conoce como *potencial de frenado:*

$$T_{max} = eV_0 \qquad \text{[II.2.1]}$$

TEORÍA CUÁNTICA DEL EFECTO FOTOELÉCTRICO:

La cantidad E de energía del fotón está relacionada con su frecuencia ν según la ecuación:

$$E = h\nu \qquad \textbf{[II.2.2]}$$

Cuando se emite un fotón desde la superficie de un metal, su energía cinética es:

$$T = h\nu - W \qquad \textbf{[II.2.3]}$$

Donde $h\nu$ es la energía del fotón y W es el trabajo necesario para sacar al electrón del metal. Por tanto, el electrón emergerá con la energía cinética máxima:

$$T_{max} = h\nu - W_0 \qquad \textbf{[II.2.4]}$$

Donde W_0 es una energía característica del metal denominada *función de trabajo* y es la energía mínima necesaria para que el electrón pase a través de la superficie del metal. Si $T_{max} = 0$ entonces se tiene:

$$h\nu_0 = W_0 \qquad \textbf{[II.2.5]}$$

De modo que un fotón de frecuencia ν_0 tiene justamente la energía suficiente para extraer los fotoelectrones y nada extra que aparezca como energía cinética. Volviendo a escribir la ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico **[II.2.4]**, sustituyendo eV_0 por T_{max}, se tiene:

$$V_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{W_0}{e} \qquad \textbf{[II.2.6]}$$

De donde se obtiene una relación lineal entre el potencial de frenado V_0 y la frecuencia ν; la pendiente es h/e.

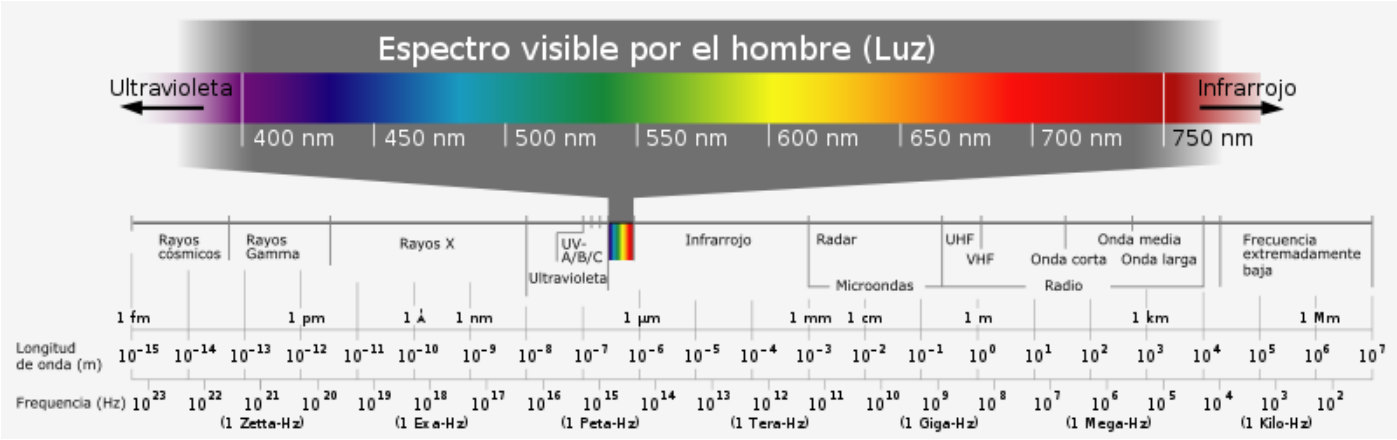


Figura II.2.4: Espectro electromagnético.

Ejemplo II.2.1: Bajo condiciones normales el ojo humano registrará una sensación visual a 5,500 Å si cuando menos se absorben 100 fotones por segundo. ¿Cuál es el nivel de potencia equivalente?

Solución: Si $\lambda = 5{,}500$ Å $\Rightarrow$ $\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3\times10^{-8}\ m/s}{5{,}500\times10^{-10}\ m} = 5.454\times10^{14}\ s^{-1}$.

Así que $E = h\nu = (6.625\times10^{-34} J\cdot s)\times(5.454\times10^{14}\ s^{-1}) = 3.613\times10^{-19} J$

$\therefore$ la potencia es: $P = 100\times(3.613\times10^{-19} J\cdot s) = 3.613\ \times10^{-17} W$. ■

PROBLEMAS: Efecto Fotoeléctrico

1. (a) La energía necesaria para extraer un electrón del sodio es de $2.3\ eV$. ¿El sodio presentará efecto fotoeléctrico para luz amarilla con 5,890 Å? (b) ¿Cuál es la longitud de onda de corte para la emisión fotoeléctrica de sodio?

Solución: La función de trabajo del sodio es $W_0 = 2.3\ eV$, para que haya efecto fotoeléctrico se requiere que $h\nu \geq W_0$, donde $\nu = \frac{3\times10^{-8}\ m/s}{5{,}800\times10^{-10}\ m} = 5.172\ \times 10^{14}\ s^{-1}$,

$\Rightarrow h\nu = (4.135 \times 10^{-15}\ eV \cdot s) \times (5.172\ \times 10^{14}\ s^{-1}) = 2.139\ eV$; por lo que esta energía no es suficiente para arrancar un fotoelectrón del material.

(b) La frecuencia de corte está dada por $\nu_0 = W_0/h$, y como $\lambda = c/\nu$;

$\Rightarrow$ La longitud de onda de corte será: $\lambda_0 = \frac{hc}{W_0} = \frac{(4.135\times10^{-15}\ eV\cdot s)\times(3\times10^{8}\ m/s)}{2.3\ eV} = 5.394 \times 10^{-7}\ m \approx 5{,}400$ Å ■

2. Sobre una superficie de aluminio incide luz de 2000 Å de longitud de onda. Se requiere de $4.2\ eV$ para extraer un electrón del aluminio. ¿Cuál será la energía cinética del (a) más rápido y (b) del más lento de los fotoelectrones emitidos? (c) ¿Cuál será el potencial de frenado? (d) ¿Cuál es la longitud de onda de corte para el aluminio? (e) Si la intensidad de la luz incidente es de $2.0\ W/m^2$, ¿Cuál es el número promedio de fotones por unidad de tiempo por unidad de área que inciden en la superficie?

Solución: Siendo $\lambda = 2000$ Å entonces $\nu = \frac{3\times10^{8} m/s}{2\times10^{-7} m} = 1.5 \times 10^{15}\ s^{-1}$;

De modo que $E = h\nu = (4.135 \times 10^{-15}\ eV \cdot s) \times (1.5 \times 10^{15}\ s^{-1}) = 6.203\ eV$.

(a) La energía cinética del más rápido será: $T_{max} = h\nu - W_0 = 6.203\ eV - 4.2\ eV = 2.003\ eV$.

(b) La energía cinética del más lento será: $h\nu_0 = W_0 = 4.2\ eV$.

(c) El potencial de frenado es: $V_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{W_0}{e} = \frac{2.003\ eV}{\text{e}} = 2.003\ V$.

(d) La longitud de onda de corte es: $\nu_0 = \frac{W_0}{h} = \frac{4.2\ eV}{4.135\times10^{-15}\ eV\cdot s} = 1.015 \times 10^{15}\ s^{-1}$.

(e) Como la intensidad es de $2.0\frac{W}{m^2} = 2.0\ J/s \cdot m^2$ y cada fotón con longitud de onda $\lambda = 2000$ Å transporta una energía de $E = h\nu = 6.203\ eV = 9.938 \times 10^{-19}\ J$ $\Rightarrow$ el número de fotones por unidad de área y por unidad de tiempo es: $\frac{2.0\ J/s\cdot m^2}{9.938\times10^{-19}\ J} = 2.01 \times 10^{18}\ s^{-1} \cdot m^{-2}$. ■

3. En un experimento fotoeléctrico en el cual se utilizan luz monocromática y un fotocátodo de sodio, se encuentra un potencial de frenado de $1.85\ V$ para $\lambda = 3000$ Å y $0.82\ V$ para $\lambda = 4000$ Å . (a) Determinar un valor para la constante de Planck. (b) Encontrar la función de trabajo en electrón-volts para el sodio y (c) la longitud de onda umbral para el sodio.

Solución: (a) podemos escribir para el potencial de frenado $V_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{W_0}{e} \Rightarrow V_{01} = \frac{h\nu_1}{e} - \frac{W_0}{e}$ y $V_{02} = \frac{h\nu_2}{e} - \frac{W_0}{e}$

De modo que: $\frac{W_0}{e} = \frac{h\nu_1}{e} - V_{01} = \frac{h\nu_2}{e} - V_{02} \Rightarrow \frac{h\nu_1}{e} - \frac{h\nu_2}{e} = V_{01} - V_{02} \Rightarrow h = \frac{(V_{01}-V_{02})e}{\nu_1-\nu_2} = \frac{(1.85-0.82)eV}{\nu_1-\nu_2}$

$\Rightarrow h = \frac{(V_{01}-V_{02})e}{\nu_1-\nu_2} = \frac{(1.85-0.82)eV}{1\times10^{15}s^{-1}-.75\times10^{15}s^{-1}} = 4.12 \times 10^{-15}\ eV \cdot s$.

(b) $W_0 = hv_1 - eV_{01} = (4.135 \times 10^{-15}\ eV \cdot s) \times (1 \times 10^{15} s^{-1}) - 1.85\ eV = 2.285\ eV$

(c) $\nu_0 = W_0/h = (2.285\ eV)/(4.135 \times 10^{-15}\ eV \cdot s) = 5.526\ \times 10^{14}\ s^{-1}$. ■

4. Una radiación con longitud de onda en el vacío de $600\ nm$ y potencia de $0.54\ W$, penetra en una célula fotoeléctrica cuyo trabajo de extracción es de $2.0\ eV$. (a) ¿Cuál es el número de fotones por segundo que viajan con la radiación? (b) ¿Cuál es la longitud de onda umbral? (c) ¿Qué energía cinética tienen los electrones emitidos. (d) ¿Cuál es la velocidad de los electrones al llegar al ánodo al aplicar un potencial de $100\ V$?

Solución: (a) Sea $\lambda = 600\ nm = 6000$ Å, la frecuencia asociada es: $\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3\times10^{-8}\ m/s}{6\times10^{-7}\ m} = 5 \times 10^{14}\ s^{-1}$,

de modo que su energía es: $E = h\nu = (6.625 \times 10^{-34} J \cdot s) \times (5 \times 10^{14}\ s^{-1}) = 3.315 \times 10^{-19}\ J$.

$\Rightarrow$ el número de fotones por segundo que viajan con la radiación es: $N_f = \frac{0.54\ J/s}{3.315\times10^{-19}\ J} = 1.63 \times 10^{18}\ s^{-1}$.

(b) La longitud de onda umbral del efecto fotoeléctrico para el cesio está dada por: $\lambda_0 = c/\nu_0$,

donde $\nu_0 = \frac{W_0}{h} = \frac{2.0\ eV}{4.135\times10^{-15}\ eV\cdot s} = 4.6343 \times 10^{14}\ s^{-1}$, entonces $\lambda_0 = \frac{3\times10^{-8}\ m/s}{4.634\times10^{14}\ s^{-1}} = 6.4734\ \times 10^{-7}\ m$.

(c) La energía cinética de los electrones emitidos es:

$T_{max} = h\nu - W_0 = (4.135 \times 10^{-15}\ eV \cdot s) \times (5 \times 10^{14}\ s^{-1}) - 2.0\ eV = 0.067\ eV = 1.086 \times 10^{-20}\ J$.

(d) La velocidad con que llegan al ánodo, si se aplica una diferencia de potencial de $100\ V$, esta dada por:

$\frac{1}{2}m_e v^2 + e\Delta V = \frac{1}{2}m_e v'^2 \Rightarrow 0.067\ eV + 100\ eV = 100.067\ eV = 1.603\ \times 10^{-17}\ J = \frac{1}{2}m_e v'^2$.

De modo que: $v'^2 = \frac{2\times 1.603\times10^{-17}\ J}{9.1\times10^{-31}\ kg} = 3.523 \times 10^{13}\ m^2/s^2$, por lo que $v' = 5.9 \times 10^6\ m/s$. ■

5. ¿Cuáles son la frecuencia, longitud de onda e impulso de un fotón cuya energía es igual a la energía de masa en reposo de un electrón?

Solución: La energía de masa en reposo de un electrón es:

$$E = m_e c^2 = (9.109 \times 10^{-31}\ kg) \times (3 \times 10^{-8}\ m/s)^2 = 8.198\ \times 10^{-14}\ J$$

De modo que la frecuencia de un fotón con esta energía es: $\nu = \frac{E}{h} = \frac{8.198\times10^{-14}\ J}{6.625\times10^{-34} J\cdot s} = 1.237 \times 10^{20} s^{-1}$.

La longitud de onda correspondiente es: $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3\times10^{-8}\ m/s}{1.237\times10^{20} s^{-1}} = 2.424 \times 10^{-12}\ m$.

Y el impulso es: $p = \frac{E}{c} = \frac{8.198\times10^{-14}\ J}{3\times10^{-8}\ m/s} = 2.732 \times 10^{-22}\ kg \cdot m/s$. ■

Rayos X: Se conoce como radiación de frenado, *bremsstrahlung*, los rayos X se producen cuándo el haz de electrones de alta energía, acelerado a través de una diferencia de potencial de miles de volts, se frenan al chocar con el blanco (es el fenómeno inverso del efecto fotoeléctrico), la desaceleración de los electrones hasta alcanzar el punto de reposo resulta en la emisión de un espectro continuo de radiación electromagnética, $\lambda_X \in [0.1,100]$ Å. Además del espectro continuo también son emitidas líneas de rayos X características del material blanco.

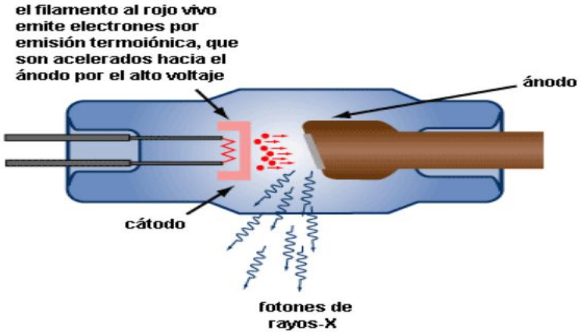


Figura II.2.5: Dispositivo para generar rayos X.

Para una energía determinada del electrón existe una longitud de onda mínima bien definida, que depende solo del potencial de aceleración V y es el mismo para todos los materiales. Esto se puede explicar considerando que un electrón de energía cinética inicial K es desacelerado mediante una colisión con un núcleo pesado, la energía que este pierde aparece en forma de radiación como un fotón de rayos X.

Si K' es la energía cinética del electrón después del choque, la energía del fotón es: $h\nu = K - K'$.

La longitud de onda está dada por: $\lambda = \frac{hc}{K-K'}$.

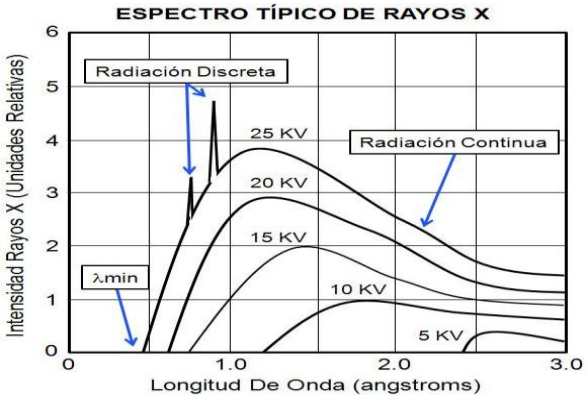


Figura II.2.6: Espectro continuo de rayos X.

Los electrones del haz incidente pueden perder diferentes cantidades de energía en las colisiones y un determinado electrón podrá alcanzar el punto de reposo solamente después de muchas de ellas. Entonces los rayos X producidos por muchos electrones son los que constituyen el espectro continuo.

El fotón de longitud de onda más corta debería de emitirse cuando un electrón pierde toda su energía cinética en un choque (proceso de desaceleración), entonces $K' = 0$, de modo que $\lambda_{min} = hc/K$, pero $K = eV$, entonces:

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eV} = \frac{hc}{h\nu_{max}} \qquad \textbf{[II.2.7]}$$

Ejemplo II.2.1: Determinar la constante de Planck h a partir del hecho de que la longitud de onda mínima de rayos X producida por electrones de 40 keV es $3.11 \times 10^{-11}\ m$.

Solución: $h = \frac{eV \cdot \lambda_{min}}{c} = \frac{(4\times10^4\ eV)\times(3.11\times10^{-11}\ m)}{3\times10^8\ m/s} = 4.146 \times 10^{-15}\ eV.$ ■

La ley de Bragg: Predice las condiciones en las que un haz (de electrones, neutrones o rayos X) difractados por un material con estructura atómica periódica produce interferencias constructivas. Al incidir un haz, formando un ángulo θ, con los planos atómicos paralelos del cristal separados una distancia d, cada plano refleja una porción de la radiación, se obtienen haces difractados cuando las reflexiones en los sucesivos planos atómicos paralelos interfieran aditivamente. Esto sucede cuando la diferencia de trayectoria entre los rayos reflejados por dos planos adyacentes sea un múltiplo entero de la longitud de onda λ, es decir: $2d \cdot sin\,\theta = n\lambda,\ \ n \in \mathbb{N}$.

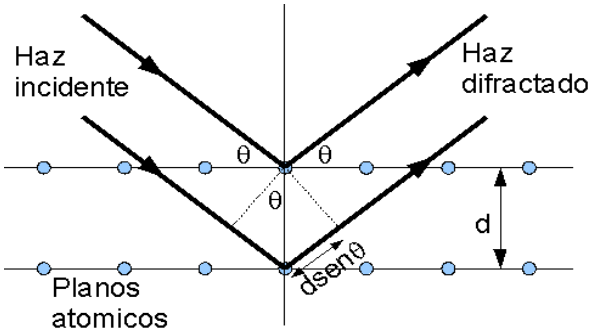


Figura II.2.7: Deducción de Ley de Bragg por diferencia de camino óptico.

II.3 Efecto Compton

Es el aumento de la longitud de onda de un fotón (de rayos X o γ) cuando choca con un electrón "libre" (débilmente ligado) y pierde parte de su energía. El cambio de longitud de onda, $\Delta\lambda$, de la radiación dispersada depende únicamente de la dirección de dispersión.

El fotón pierde energía igual a la ganada por el electrón en el "choque elástico".

Entonces: $h\nu - h\nu' = T$, y para el fotón que no tiene masa en reposo:

$$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2} = pc = h\nu.$$

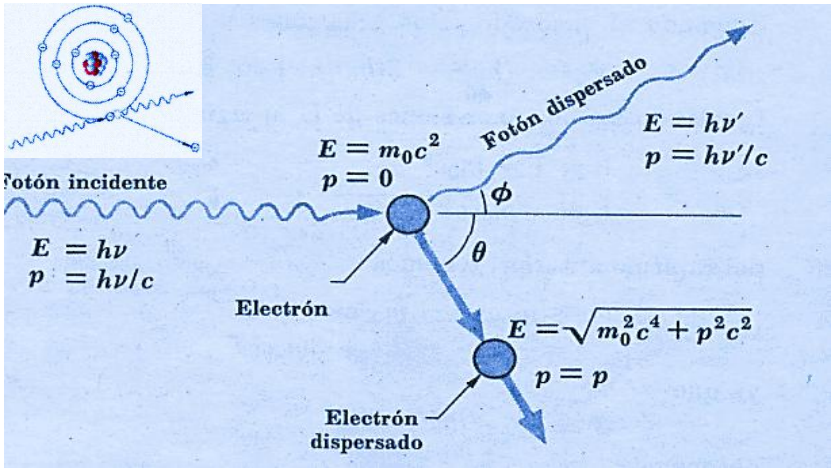


Figura II.3.1: Dispersión Compton para fotones de rayos X ó γ.

Entonces, $p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c}$; pero el momento lineal es un vector!: $\boldsymbol{p}$.

De modo que: en la dirección X: $$\frac{h\nu}{c} + 0 = \frac{h\nu'}{c}\cos\phi + p_e\cos\theta \qquad \textbf{[II.3.1]}$$

y en la dirección Y: $$0 = \frac{h\nu'}{c}\sin\phi - p_e\sin\theta$$

Elevando al cuadrado y sumando estas dos ecuaciones para eliminar la variable θ, se obtiene:

$$(h\nu)^2 - 2(h\nu)(h\nu')\cos\phi + (h\nu')^2 = p_e^2c^2 \qquad \textbf{[II.3.2]}$$

Igualando las dos expresiones de la energía total de una partícula:

$$E = T + m_0c^2 \qquad \textbf{[II.3.3]}$$

$$E = \sqrt{(m_0c^2)^2 + p^2c^2}$$

Se obtiene: $$p^2c^2 = T^2 + 2Tm_0c^2 = (h\nu)^2 - 2(h\nu)(h\nu') + (h\nu')^2 + 2m_0c^2(h\nu - h\nu') \qquad \textbf{[II.3.4]}$$

Ya que $T = h\nu - h\nu'$. Ahora, igualando con **[II.3.2]** se obtiene finalmente:

$$m_ec^2(h\nu - h\nu') = (h\nu)(h\nu')(1 - \cos\phi) \qquad \textbf{[II.3.5]}$$

Que en términos de la longitud de onda y para el caso de un electrón permite escribir:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_ec}(1 - \cos\phi) \qquad \textbf{[II.3.6]}$$

donde $\frac{h}{m_ec} = 0.024$ Å, que se conoce como Longitud de Onda Compton.

El corrimiento $\Delta\lambda$, solo depende del ángulo de dispersión y no de la longitud de onda inicial. Se observa, además que, la frecuencia de radiación dispersa no depende del material blanco, lo cual implica que la dispersión no involucra átomos completos, solo electrones libres (si la energía que adquieren en la colisión es mucho mayor que su energía de enlace) e inicialmente "estacionarios".

Si un electrón está fuertemente ligado no será expulsado del átomo y el fotón será dispersado por el átomo completo sin modificar su longitud de onda esencialmente, esto se conoce como dispersión de Thompson.

Así que para longitudes de onda pequeñas, $\lambda \to 0$ (como corresponden a los rayos X o γ) en blancos dispersores de número atómico bajo donde los electrones atómicos no están muy fuertemente ligados se tiene dispersión Compton, en cambio para $\lambda \to \infty$ dominará la dispersión de Thompson, caso en el que concuerdan los resultados clásicos y los cuánticos.

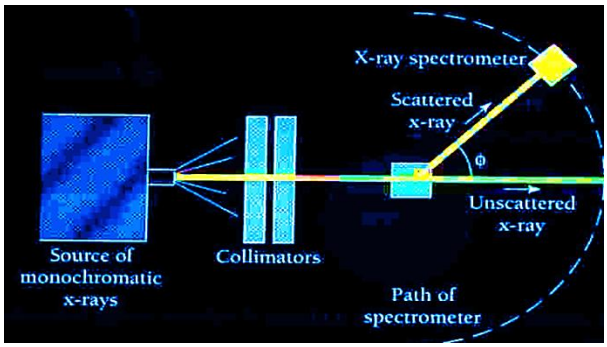


Figura II.3.2: Dispositivo experimental Compton.

Ejemplo II.3.1: Considérese un haz de rayos X con $\lambda = 1.0$ Å , y también un haz de rayos γ provenientes de una muestra de Cs^{137} con $\lambda = 1.88 \times 10^{-2}$ Å. Si la radiación dispersada por los electrones libres se observa a 90° del has incidente: (a) ¿Cuál es el corrimiento en longitud de onda Compton en cada caso? (b) ¿Qué energía cinética se le comunica al electrón de retroceso en cada caso? (c) que porcentaje de la energía del fotón incidente se pierde en cada caso?

Solución: (a) El corrimiento Compton con $\theta = 90°$, es: $\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - cos\,\phi) = 0.024$ Å.

Este resultado es independiente de la longitud de onda incidente y por lo tanto es el mismo para rayos X y para rayos γ.

(b) Ya que la energía cinética que se le comunica a los electrones es la misma que pierden los fotones se tiene:

Para los rayos X se tiene que: $\lambda' = 0.024$ Å $+ \lambda = 0.024$ Å $+ 1.000$ Å $= 1.024$ Å,

$$\Rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3\times10^8\ m/s}{1.000\times10^{-10}\ m} = 3 \times 10^{18}\ s^{-1} \quad \text{y} \quad \nu' = \frac{c}{\lambda'} = \frac{3\times10^8\ m/s}{1.024\times10^{-10}\ m} = 2.929 \times 10^{18}\ s^{-1}$$

De modo que:

$$\Delta E = h\nu' - h\nu = (6.625 \times 10^{-34} J \cdot s) \times (2.929 \times 10^{18}\ s^{-1} - 3 \times 10^{18}\ s^{-1}) = -4.658 \times 10^{-17}\ J\ .$$

Análogamente para la radiación γ se tiene: $\lambda' = 0.024$ Å $+ \lambda = 0.024$ Å $+ 0.018$ Å $= 0.0428$ Å,

$$\Rightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3\times10^8\ m/s}{0.0188\times10^{-10}\ m} = 159.547 \times 10^{18}\ s^{-1} \quad \text{y} \quad \nu' = \frac{c}{\lambda'} = \frac{3\times10^8\ m/s}{0.0428\times10^{-10}\ m} = 70.093 \times 10^{18}\ s^{-1}$$

De modo que:

$$\Delta E = h\nu' - h\nu = (6.625 \times 10^{-34} J \cdot s) \times (70.093 \times 10^{18}\ s^{-1} - 159.547 \times 10^{18}\ s^{-1}) = -5.926 \times 10^{-14}\ J\ .$$

c) La energía perdida por el fotón es igual a la energía ganada por el electrón.

Entonces, para los rayos X se tiene que: $E = h\nu = (6.625 \times 10^{-34} J \cdot s) \times (3 \times 10^{18}\ s^{-1}) = 1.987 \times 10^{-15} J$.

Así que: $\frac{-4.658\times10^{-17}\ J}{1.987\times10^{-15} J} \times 100 = 2.34$ %.

Análogamente para los rayos γ: $E = h\nu = (6.625 \times 10^{-34} J \cdot s) \times (159.547 \times 10^{18}\ s^{-1}) = 1.056 \times 10^{-113} J$.

Así que: $\frac{-5.926\times10^{-14}\ J}{1.056\times10^{-113} J} \times 100 = 56.06$ % ■

PROBLEMAS: Efecto Compton

1. ¿Cuánta energía debe tener un fotón para tener el momentum de un protón de 10 MeV?

Solución: La energía cinética del protón es: $\frac{1}{2}m_p v^2 = 10\ MeV$,

de modo que $v = \sqrt{\frac{2\times10^7\ eV}{1{,}672\ 6\times10^{-27}\ kg}} = \sqrt{\frac{2\times10^7\times 1.602\times10^{-19} J}{1{,}672\times10^{-27}\ kg}} = 4.377\times10^7\ m/s$

Así que su momentum es: $m_p v = (1{,}672\times10^{-27}\ kg)\times(4.377\times10^7\ m/s) = 7.318\times10^{-20}\ kg\cdot m/s$

La energía de un fotón es: $E = pc$, sustituyendo p por el momento del protón se tiene:

$E = pc = (7.318\times10^{-20}\ kg\cdot m/s)\times(3\times10^8\ m/s) = 2.195\times10^{-11}\ J = 1.369\times10^8\ eV$ ■

2. ¿Cuál es la frecuencia de un fotón de rayos X cuyo momentum es $1.1\times10^{-23}\ kg\cdot m/s$

Solución: La energía del fotón es: $E = pc = (1.1\times10^{-23}\ kg\cdot m/s)\times(3\times10^8\ m/s) = 3.3\times10^{-15}\ J$.

Así que su frecuencia es: $\nu = \frac{E}{h} = \frac{3.3\times10^{-15}\ J}{6.625\times10^{-34} J\cdot s} = 4.981\times10^{18}\ Hz$. ■

3. Un haz de rayos X es dispersado por electrones libres. A 45° de la dirección del haz, los rayos X dispersados tienen una longitud de onda de 0.022 Å. ¿Cuál es la longitud de onda de los rayos X en el haz original?

Solución: La fórmula de Compton establece que: $\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - cos\,\phi)$.

De modo que: $\lambda = -\frac{h}{m_e c}(1 - cos\,\phi) + \lambda' = -0.024\ \text{Å}\times(1 - cos\,\pi/4) + 0.022\ \text{Å} = 0.014\ \text{Å}$. ■

4. Un fotón de rayos X de frecuencia inicial $3\times10^{19}\ Hz$ choca con un electrón y es dispersado a 90°. Determinar su nueva frecuencia.

Solución: Para la frecuencia inicial la longitud de onda correspondiente es: $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3\times10^8\ m/s}{3\times10^{19} s^{-1}} = .1\times10^{-10}\ m$

La fórmula de Compton establece que: $\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - cos\,\phi)$.

De modo que: $\lambda' = \frac{h}{m_e c}(1 - cos\,\phi) + \lambda = 0.024\ \text{Å}\times(1 - cos\,\pi/2) + 0.1\ \text{Å} = 0.124\ \text{Å}$.

Entonces la nueva frecuencia es $\nu' = \frac{c}{\lambda'} = 2.419\times10^{19}\ Hz$ ■

5. Sobre electrones libres inciden fotones de longitud de onda 0.024 Å encontrar la longitud de onda de un fotón que es dispersado a 30° de la dirección incidente y la energía cinética suministrada al electrón de retroceso.

Solución: $\lambda' = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\phi) + \lambda = \left(0.024\ \text{Å}\right)\times(1 - \cos(\pi/6)) + 0.024\ \text{Å} = 0.027\ \text{Å}$.

La energía suministrada es entonces: $\Delta E = h\nu' - h\nu = hc\left(\frac{1}{\lambda'} - \frac{1}{\lambda}\right)$

$\Rightarrow E = (4.135\times10^{-15}\ eV\cdot s)\times(3\times10^8\ m/s)\times\left(\frac{1}{0.027\times10^{-10}\ m} - \frac{1}{0.024\times10^{-10}\ m}\right) = 0.0574\ MeV$. ■

Producción y aniquilación de pares: Es posible que un fotón se materialice en un electrón y un positrón (electrón positivo) cerca de un núcleo atómico. Los principios de conservación no se violan, las suma de las cargas del electrón ($q = -e$) y del positrón ($q = +e$) es cero. La energía total incluyendo la de la masa de ambas partículas es igual a la del fotón. La energía en reposo m_0c^2 de un electrón o de un positrón es de $0.51\ MeV$, por lo que la producción de pares requiere una energía del fotón de al menos $1.02\ MeV$. La longitud de onda máxima del fotón correspondiente es de 0.012 Å que se asocia a los rayos γ que se producen núcleos radioactivos y rayos cósmicos. Cualquier energía adicional, se transforma en energía cinética del electrón y del positrón, $K_{\mp}$. Así que $h\nu = K_- + K_+ + 2m_0c^2$.

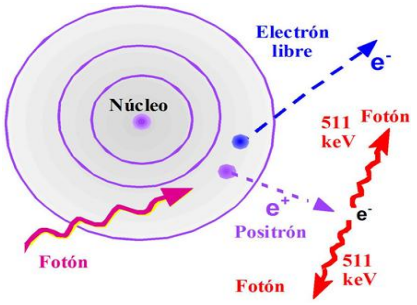


Figura II.3.3: El momentum se conserva ya que el núcleo atómico absorbe parte de la energía del fotón.

El proceso inverso a la producción de pares es la *aniquilación*, cuando un electrón y un positrón colisionan anulándose para crear un par de fotones con direcciones opuestas para conservar la energía cinética y el momentum lineal; y por lo que no se requiere un núcleo u otra partícula para que la aniquilación ocurra.

Así que: $p_1 = p_2$, por lo que $m_0c^2 + m_0c^2 = h\nu + h\nu$; o bien, $\lambda = h/p = h/m_0c$.

Los resultados experimentales demuestran que la absorción de fotones en la interacción con la materia ocurre principalmente mediante el proceso fotoeléctrico para energías bajas, por el efecto Compton para energías medias y mediante producción de pares (electrón-positrón, protón-antiprotón, etc.) para energías altas.

Ejemplo II.3.2 Una cámara de burbujas revela la creación de un par electrón-positrón al pasar fotones a través de la materia. Las trazas de las partículas tienen curvaturas opuestas en el campo magnético uniforme $B = 0.20\ weber/m^2$ ($1\ weber = 1\ V \cdot s = 1\ J \cdot s/C$); con radios $r = 2.5 \times 10^{-2}\ m$. ¿Cuál era la energía y longitud de onda del fotón productor del par?

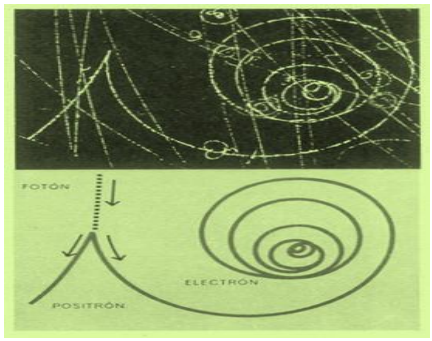


Figura II.3.4: Cámara de burbujas.

Solución: El impulso p del electrón está dado por:

$$p = eBr = (1.6 \times 10^{-19}\ C) \times (2.0 \times 10^{-1}\ weber/m^2) \times (2.5 \times 10^{-2}\ m)$$

$$= 8.0 \times 10^{-22}\ kg \cdot m/s.$$

Su energía relativista total está dada por: $E_-^2 = c^2p^2 + (m_0c^2)^2$.

Puesto que, $m_0c^2 = 0.51\ MeV$ y $pc = (8.0 \times 10^{-22}\ kg \cdot m/s) \times (3 \times 10^8\ m/s) = 2.4 \times 10^{-13}\ J = 1.5\ MeV$,

Se tiene que: $E_-^2 = (1.5\ MeV)^2 + (0.51\ MeV)^2 = 2.510\ (MeV)^2$ por tanto, $E = 1.584\ MeV$.

La energía relativista total del positrón tenía el mismo valor ya que su traza tenía el mismo radio, de modo que la energía del fotón era: $h\nu = E_- + E_+ = 3.168\ MeV$, y su longitud de onda: $\lambda = hc/E = 0.0039$ Å. ■

Ejemplo II.3.3 Si un proceso de aniquilación es observado desde un sistema de referencia con velocidad $\boldsymbol{v}$ paralela a la dirección de emisión de los fotones. ¿Qué longitud de onda se observa para cada uno?

Solución: En el sistema de referencia en movimiento, el par tiene la energía relativista: $2mc^2 = p_1'c + p_2'c$.

Por la conservación del impulso, $2mv = p_1' - p_2'$. Los fotones se mueven en direcciones opuestas.

Combinando ecuaciones: $p_{1,2}' = m(c \pm v) = \frac{m_0(c \pm v)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = m_0\sqrt{\frac{c \pm v}{c \mp v}}$ $\Rightarrow$ $\lambda_{1,2} = \frac{h}{p_{1,2}'}$ (*Efecto Doppler*). ■

II.4 DIFRACCIÓN DE PARTÍCULAS

Experimento de difracción en doble rendija: Un dispositivo experimental se muestra en la figura. Una onda de luz monocromática es emitida por la fuente $\mathcal{S}$ hacia la pantalla opaca $\mathcal{P}$ en la que se han practicado dos ranuras angostas $\mathcal{F}_1$ y $\mathcal{F}_2$, que iluminan la pantalla de observación $\mathcal{E}$ (placa fotográfica). Si se bloquea $\mathcal{F}_2$, se obtiene en $\mathcal{E}$ la distribución de intensidad $I_1(x)$ que es el patrón de difracción de $\mathcal{F}_1$. De la misma manera, cuando se obstruye $\mathcal{F}_1$, el patrón de difracción de $\mathcal{F}_1$ queda descrito por $I_2(x)$.

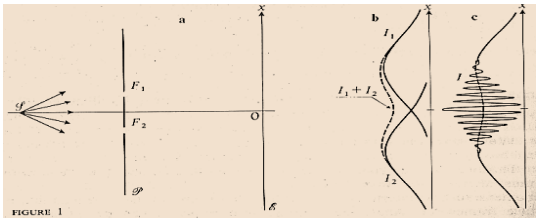


Figura II.4.1: Experimento de Young.

Cuando están abiertas ambas ranuras, se observa un sistema de franjas de interferencia en la pantalla.

La interferencia constructiva ocurre en un punto P de la pantalla que se encuentra a un número entero n de longitudes de onda λ más alejada de una rendija que de la otra. Si r_1 y r_2 son las distancias del punto en la pantalla a las dos rendijas, entonces una condición para la máxima interferencia constructiva es $|r_1 - r_2| = n\lambda$. Es decir, cuando cualquier cresta de onda de una rendija llegue simultáneamente con otra de la otra rendija, independientemente de que sea la siguiente, la tercera, la cuarta, etc.

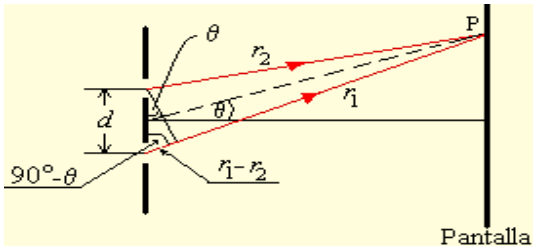


Figura II.4.2: Interferencia constructiva.

La interferencia destructiva ocurre cuando $|r_1 - r_2| = (n + 1/2)\lambda$; es decir, cuando la cresta de una onda proveniente de una rendija coincide con el valle de la onda proveniente de la otra rendija.

Por otro lado, la intensidad $I(x)$ no es la suma de las intensidades producidas por $\mathcal{F}_1$ y $\mathcal{F}_2$ por separado: $I(x) \neq I_1(x) + I_2(x)$. Conviene recordar que la teoría ondulatoria da una interpretación natural de las franjas de interferencia. La intensidad de la luz en un punto de la pantalla es proporcional al cuadrado de la amplitud del campo eléctrico en ese punto. Si $E_1(x)$ y $E_2(x)$ representan, en notación compleja, los campos eléctricos producidos en el punto P con coordenada x, por las ranuras $\mathcal{F}_1$ y $\mathcal{F}_2$ respectivamente (las ranuras van a ser como fuentes secundarias), la resultante del campo eléctrico en ese punto cuando ambas ranuras están abiertas es: $E(x) = E_1(x) + E_2(x)$. En notación compleja:

$$I(x) \propto |E(x)|^2 = |E_1(x) + E_2(x)|^2 = \left|A_1 e^{i\theta_1} + A_2 e^{i\theta_2}\right|^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2\cos(\theta_1 - \theta_2) \qquad \text{[II.4.1]}$$

Ya que las intensidades $I_1(x)$ y $I_2(x)$ son proporcionales al promedio de un ciclo de la intensidad del campo eléctrico de la onda, respectivamente, a $|E_1(x)|^2$ y $|E_2(x)|^2$, la fórmula muestra que $I(x)$ difiere de $I_1(x) + I_2(x)$ por un término de interferencia que depende de la diferencia de fases entre E_1 y E_2.

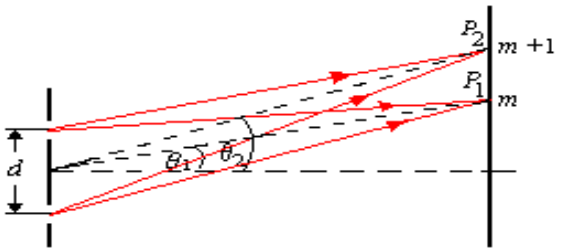
NOTA: Si se cubre la pantalla con una placa fotográfica y se incrementa el tiempo de exposición para capturar un número grande de fotones, las franjas no desaparecen, así que la pura interpretación corpuscular, de acuerdo con la interacción entre fotones debe ser desechada. Se puede exponer la placa fotográfica durante un tiempo corto, para que solo pueda recibir pocos fotones. Entonces, cada fotón produce un impacto localizado y no un patrón de interferencia débil, de modo que la sola interpretación ondulatoria también debe ser desechada. A medida que más y más fotones chocan con la placa, los impactos individuales aparecen distribuidos aleatoriamente, y solo cuando un número grande de estos han alcanzado la pantalla, la distribución de los impactos comienza a tener un aspecto continuo. Desde el punto de vista de los fotones o corpuscular la intensidad de radiación $I = (1/\mu_0)|E|^2$ se escribe como $I = Nh\nu$, donde N es el número de fotones que cruzan una unidad de área perpendicular a la dirección de propagación. La densidad de impactos en la pantalla corresponde a franjas de interferencia, máxima en la franja más brillante y cero en la más oscura. Se puede decir que, *a medida que los fotones van llegando a la pantalla van construyendo el patrón de interferencia*.

PROBLEMAS: Experimento Young, difracción de la doble rendija

1. Diseñar una doble rendija que produzca franjas de interferencia separadas 1° sobre una pantalla distante. Suponer que se tiene una luz de sodio $\lambda = 589\, nm$.

Solución: El patrón de interferencia que se observa en la pantalla consiste en franjas oscuras (los mínimos) y franjas amarillas (los máximos) entre ellas.

El punto P_1 corresponde a la posición de un máximo de orden m y el punto P_2 corresponde al máximo adyacente de orden $(m + 1)$. La posición angular del máximo de orden m es θ_1 y del máximo $(m + 1)$ es θ_2.



Utilizando la fórmula de los máximos de interferencia, se obtiene para el orden m: $d\, sin\, \theta_1 = m\lambda$, y para el orden $(m + 1)$: $d\, sin\, \theta_2 = (m + 1)\lambda$.

Resolviendo las dos ecuaciones se tiene: $d(sin\, \theta_2 - sin\, \theta_1) = \lambda$.

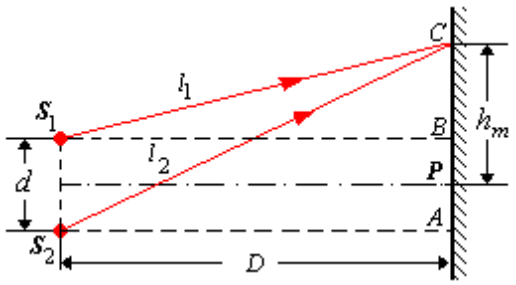
Considerando que los ángulos son pequeños se puede escribir: $d(\theta_2 - \theta_1) = \lambda$

$\Rightarrow\ d = \frac{\lambda}{1°} = \frac{589 \times 10^{-9} m}{0.174\, rads} = 0.034\ \times 10^{-3}\, m = 0.034\, mm.$ ■

2. En el experimento de Young la doble rendija se ilumina con luz monocromática cuya longitud de onda es igual a $6 \times 10^{-7} m$. La distancia entre las rendijas es de $1\, mm$. Las rendijas se encuentran a una distancia de $3\, m$ de la pantalla. Encontrar la posición de las tres primeras franjas brillantes de interferencia.

Solución: Las rendijas se pueden considerar como dos fuentes coherentes de luz, S_1 y S_2. Si la diferencia de camino óptico es $\Delta = m\lambda$; donde $m = 0, 1, 2, 3, ...$, entonces en la pantalla aparece la franja brillante (el máximo de iluminación).

En la figura, l_1 y l_2 son recorridos de los rayos que provienen de las fuentes S_1 y S_2, respectivamente, y se interfieren en el punto C de la pantalla.



De los triángulos S_1BC y S_1AC tenemos: $l_1^2 = D^2 + \left(h_m + \frac{d}{2}\right)^2$ y $l_2^2 = D^2 + \left(h_m - \frac{d}{2}\right)^2$.

Restando la segunda de la primera se tiene que: $l_2^2 - l_1^2 = (l_1 + l_2)(l_1 - l_2) = 2dh_m$.

Como $d \ll D\ \Rightarrow (l_1 + l_2) = 2D$; de modo que: $(l_1 - l_2) = \frac{dh_m}{D}$.

Pero $(l_1 - l_2) = \Delta = m\lambda$; igualando estas expresiones y reacomodando se puede escribir: $h_m = m\lambda\frac{D}{d}$.

Por tanto, para $m = 1$, se tiene: $h_1 = \lambda\frac{D}{d} = (6 \times 10^{-7} m)\frac{3\, m}{1 \times 10^{-3}\, m} = 1.8\ \times 10^{-3}\, m$,

para la segunda franja brillante, $h_2 = 2h_1 = 3.6\ \times 10^{-3}\, m$,

y para la tercera franja brillante, , $h_3 = 3h_1 = 5.4\ \times 10^{-3}\, m$. ■

II.5 HIPÓTESIS DE DE BROGLIE

Las partículas pueden comportarse como ondas y viceversa, entonces tienen un momento: $p = mv = \frac{hv}{c}$. Que se puede expresar en función de la longitud de onda como:

$$\lambda_B = \frac{h}{mv} \qquad \textbf{[II.5.1]}$$

Cuanto mayor es el momento de una partícula, menor es su longitud de onda. En la ecuación **[II.5.1]** m es la masa relativista: $m = m_0/\sqrt{1 - v^2/c^2}$.

Principio de complementariedad: Los modelos corpuscular y ondulatorio son complementarios, si una medición prueba el carácter ondulatorio de la materia entonces es imposible probar la naturaleza corpuscular en el mismo experimento y viceversa.

Ejemplo II.5.1 (a) ¿Cuál será la longitud de onda de De Broglie de una pelota de beisbol de masa $m = 1\ kg$ que se mueve a una velocidad $v = 10\ m/s$? (b) ¿Cuál es la longitud de onda de un electrón cuya energía cinética es $100\ eV$?

Solución: (a) De la ecuación **[II.5.1]** se tiene: $\lambda_B = \frac{h}{mv} = \frac{(6.625\times10^{-34}\,J\cdot s)}{(1\ kg)\times\left(10\,\frac{m}{s}\right)} = 6.625\times10^{-35}\ m$.

(b) Entonces: $\frac{1}{2}m_e v^2 = 100\ eV$, de donde: $v = \sqrt{\frac{200\ eV}{m_e}} = \sqrt{\frac{200\times(1.602\times10^{-19}\ J)}{9.109\times10^{-31}\ kg}} = 5.930\times10^{6}\ m/s$.

Así que: $\lambda_B = \frac{h}{mv} = \frac{6.625\times10^{-34}\,J\cdot s}{(9.109\times10^{-31}\ kg)\times(5.930\times10^{6}\ m/s)} = 1.226\ \text{Å}$. ■

Velocidad de onda de De Broglie: Puesto que se ha asociado una onda con un cuerpo en movimiento, es razonable suponer que se propaga a la misma velocidad v del cuerpo:

$$v_B = \lambda_B \nu_B = \frac{h}{mv}\cdot\frac{mc^2}{h} = \frac{c^2}{v} \quad \textbf{!} \qquad \textbf{[II.5.2]}$$

donde $\lambda_B = h/mv$ y $\nu = E/h$, ya que $E = h\nu$; y como $E = mc^2$, entonces $\nu = mc^2/h$. Pero como la velocidad v de la partícula debe ser siempre menor que la velocidad de la luz, c, ¡resulta que la velocidad de De Broglie v_B es siempre mayor que c!

La manera de poder asociar de manera coherente una velocidad a la onda de De Broglie a un cuerpo en movimiento es considerar que la onda asociada consiste en un paquete de ondas y que tiene la velocidad de grupo de dicho paquete. Lo que resulta en que: ¡sí es la misma velocidad que la del cuerpo en movimiento!

Un paquete de ondas o superposición lineal de ondas, que toman la forma de un pulso o grupo de ondas, y se desplaza de modo compacto en el espacio antes de dispersarse. Al interferir las ondas individuales dan variaciones en las amplitudes que definen la forma del grupo. Si las velocidades de onda son iguales, la velocidad con que el grupo de ondas se propaga es la común. Si la velocidad de onda varía con la longitud de onda entonces las ondas individuales no avanzan juntas y el grupo tiene una velocidad diferente de las ondas que lo componen.

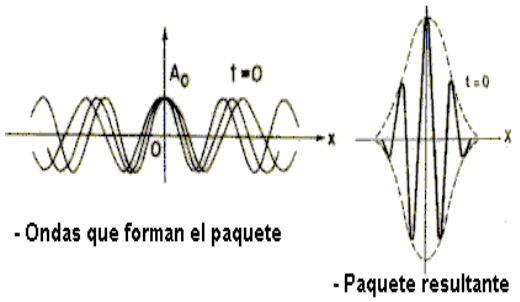


Figura II.5.1: Paquete de ondas.

Considérese la suma de ondas: $y = y_1 + y_2 = A\cos(\omega t - kx) + A\cos[(\omega + d\omega)t - (k + dk)x]$

Ya que: $cos\,\alpha + cos\,\beta = 2 \cdot cos\,(\alpha + \beta)/2 \cdot cos\,(\alpha - \beta)/2$ y $\cos(-\theta) = \cos\theta$.

Se tiene que: $y = 2A \cdot cos\,[(2\omega + d\omega)t - (2k + dk)x]/2 \cdot cos\,(d\omega\, t - dk\, x)/2$

Puesto que $d\omega \ll \omega$ y $dk \ll k$, entonces, $2\omega + d\omega \approx 2\omega$, $2k + dk \approx 2k$. Así que:

$$y \approx 2A \cdot cos\,(\omega t - kx) \cdot cos\,\left(\frac{d\omega}{2}t - \frac{dk}{2}x\right) \qquad \textbf{[II.5.3]}$$

Es una onda con frecuencia angular ω y constante de propagación k con una modulación de frecuencia angular $d\omega/2$ y constante de propagación $dk/2$. El efecto de la modulación es producir grupos de ondas sucesivos.

Velocidad de fase: Es la tasa a la cual la fase de un paquete de ondas se propaga en el espacio. Está dada en términos de la velocidad angular de la onda ω y del vector de onda k por la relación: $v_p = \frac{\omega}{k}$.

Para una onda de De Broglie la velocidad de fase es: $v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{v}$, que es mayor que la velocidad de la luz c y por tanto mayor que la velocidad del cuerpo en movimiento, por lo que su significado físico no es sencillo.

Velocidad de grupo: Es la velocidad con la que las variaciones de la amplitud de un paquete de ondas se propagan en el espacio: $v_g = \frac{d\omega}{dk}$; es decir, el cambio en la velocidad angular respecto al número de onda. En general, la velocidad de grupo puede ser mayor o menor que la velocidad de fase.

La velocidad de grupo de las ondas de De Broglie asociadas al cuerpo en movimiento es: $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\omega/dv}{dk/dv}$,

Con: $d\omega/dv = d\left(\frac{2\pi m_0 c^2}{h\sqrt{1-v^2/c^2}}\right)/dv = \frac{2\pi m_0 v}{h(1-v^2/c^2)^{3/2}}$ y $dk/dv = d\left(\frac{2\pi m_0 v}{h\sqrt{1-v^2/c^2}}\right)/dv = \frac{2\pi m_0}{h(1-v^2/c^2)^{3/2}}$.

De donde: $v_g = v$. El grupo de ondas de De Broglie de un cuerpo se propaga con la misma velocidad de este.

Para un número infinito de ondas que se combinen para formar un grupo en movimiento se puede demostrar que las relaciones encontrada para ambas velocidades son exactamente las mismas. La amplitud de la onda de De Broglie en magnitud cuadrada está relacionada con la probabilidad de encontrar a la partícula.

Ejemplo II.5.2 Un mesón π^0 en reposo decae en dos fotones con igual energía. ¿Cuál es la longitud de onda de los fotones? La masa del mesón μ^0 es $135\ MeV/c^2$.

Solución: Cada fotón porta una energía de: $E = \frac{m_\pi c^2}{2} = \frac{135}{2} MeV = 67.5\ MeV$.

$E = cp$ de modo que $p = E/c$; y como $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{E} = \frac{(4.135\times10^{-15}\ eV\cdot s)\times(3\times10^8\ m/s)}{67.5\times10^6\ eV} = 1.837\times10^{-14}\ m$. ■

Ejemplo II.5.3 Muestre que la longitud de onda de De Broglie para un neutrón está dada por: $\lambda = 0.286\ \text{Å}/\sqrt{E}$, donde E se expresa en electrón-volts.

Solución: $\lambda_B = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2\times m_n \times E}} = \frac{hc}{\sqrt{2\times c^2 m_n \times E}} = \frac{(4.135\times10^{-15}\ eV\cdot s)\times(3\times10^8\ m/s)}{\sqrt{2\times(939\times10^6 eV)\times E}} = .2862\ \text{Å}/\sqrt{E}$.

Donde se ha tomado la masa del neutrón como: $m_n = 939.565\ MeV/c^2$. ■

II.6 PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

Relaciones de incertidumbre de Heisenberg: El principio de incertidumbre, también conocido como *principio de indeterminación*, establece la imposibilidad de que determinados pares de magnitudes físicas sean conocidas con precisión arbitraria. Si se preparan varias copias idénticas de un sistema en un estado determinado, como puede ser un átomo, las medidas de la posición y de la cantidad de movimiento variarán de acuerdo con una cierta distribución de probabilidad característica del estado cuántico del sistema. Las medidas del objeto observable sufrirán desviación estándar Δx de la posición y el momento Δp_x. Esto se expresa matemáticamente como:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2 \qquad \textbf{[II.6.1]}$$

Donde (*h barra)* $\hbar = h/2\pi$; y de manera análoga para las otras componentes $\Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2$ y $\Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2$. $\hbar = 1.054 \times 10^{-34}\, J \cdot s,\ h = 6.626 \cdot 10^{-34}\, J \cdot s = 4.1 \times 10^{-15} eV \cdot s$.

Partícula libre: Una de las formas alternativas del principio de incertidumbre más conocida es la *indeterminación del tiempo-energía:*

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2 \qquad \textbf{[II.6.2]}$$

Que establece un límite para la medida de la energía E y el tiempo t necesario para hacer la medición. Por ejemplo, el intervalo de tiempo Δt durante el cual un fotón es emitido con una variación en su energía ΔE. Para el caso de una partícula libre, **[II.6.2]** se puede obtener de **[II.6.1]**; para ello, considérese un electrón que se mueve a lo largo del eje X y cuya energía se puede escribir como $E = p_x^2/2m$. Si la incertidumbre en p_x está dada por Δp_x, entonces la incertidumbre en E estará dada por $\Delta E = (p_x/2m)\, \Delta p_x = v_x\, \Delta p_x$. En este caso v_x puede interpretarse como la velocidad de retroceso a lo largo de X, del electrón que es iluminado para medir su posición o si el tiempo requerido para una medida es Δt, entonces la incertidumbre en su posición x es $\Delta x = v_x \Delta t$. Combinado $\Delta t = \Delta x/v_x$ y por $\Delta E = v_x\, \Delta p_x$, se obtiene $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$.

Ejemplo II.6.1 La velocidad de una tabla ($m = 50\ g$) y la velocidad de un electrón ($m_e = 9.109 \times 10^{-31}\ kg$) se miden y resultan iguales, a $300\ m/s$, con una incertidumbre del 0.01 %. ¿Cuál será la exactitud fundamental con que se podrá determinar la posición de cada una, si la posición y la velocidad se miden simultáneamente en el mismo experimento?

Solución: Para el electrón $p = m_e v = (9.109 \times 10^{-31}\ kg) \times (300\ m/s) = 2.732 \times 10^{-28}\ kg \cdot m/s$,

y $\Delta p = m_e \Delta v = 0.0001 \times 2.732 \times 10^{-28}\ kg \cdot m/s = 2.732 \times 10^{-32}\ kg \cdot m/s$.

De modo que; $\Delta x = \frac{h}{4\pi \Delta p} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34}\ J \cdot s}{4\pi \times (2.732 \times 10^{-32}\ kg \cdot m/s)} = 1.929 \times 10^{-3}\ m$.

Para la tabla $p = mv = (0.05\ kg) \times (300\ m/s) = 15\ kg \cdot m/s$,

y $\Delta p = m \Delta v = 0.0001 \times 15\ kg \cdot m/s = 1.5 \times 10^{-3}\ kg \cdot m/s$.

De modo que; $\Delta x = \frac{h}{4\pi \Delta p} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34}\ J \cdot s}{4\pi \times (1.5 \times 10^{-3}\ kg \cdot m/s)} = 3.515 \times 10^{-32}\ m$.

Por lo tanto, para objetos macroscópicos el principio de incertidumbre no impone límites prácticos en el procedimiento de medición, pero para objetos microscópicos como un electrón esto si ocurre. ■

Ejemplo II.6.2 Un átomo puede radiar en cualquier momento después de ser excitado. En un caso típico, se encuentra que la vida media de un átomo excitado promedio es de $10^{-8}\ s$. Es decir, durante este tiempo emite un fotón y sale de su estado de excitación. (a) ¿Cuál es la incertidumbre $\Delta \nu$ mínima en la frecuencia del fotón?

(b) En átomos de sodio, la mayoría de los fotones corresponden a dos líneas espectrales de aproximadamente $\lambda = 5{,}890$ Å . ¿Cuál será la fracción de la amplitud $\Delta\nu/\nu$ correspondiente a cada línea? (c) Calcule la incertidumbre en la energía ΔE, del estado excitado del átomo. (d) Determine la energía del estado excitado hasta una precisión ΔE.

Solución: (a) $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$, y como $p = \frac{h\nu}{c} \Rightarrow \Delta p = \frac{h\Delta\nu}{c}$; Así que $\Delta x \frac{h\Delta\nu}{c} \geq \frac{\hbar}{2}$; o bien, $\frac{\Delta x \Delta\nu}{c} \geq \frac{\hbar}{2h} = \frac{1}{4\pi}$.

Así entonces, $\Delta t \Delta\nu \geq \frac{1}{4\pi}$. $\Rightarrow$ $\Delta\nu \geq \frac{1}{4\pi\Delta t}$, con $\Delta t = 10^{-8}\ s$ $\therefore$ $\Delta\nu \geq 8 \times 10^{6}\ s^{-1}$.

(b) Para $\lambda = 5{,}890$ Å se obtiene $\nu = c/\lambda = (3 \times 10^{8}\ m/s)/(5{,}890 \times 10^{-10}\ m) = 5.1 \times 10^{14}\ s^{-1}$.

Por lo tanto, $\Delta\nu/\nu = (8 \times 10^{6}\ s^{-1})/(5.1 \times 10^{14}\ s^{-1}) = 1.6 \times 10^{-8}$. Esta es la llamada *amplitud natural* de la línea espectral. En la práctica la línea es más ancha por el efecto Doppler.

(c) La energía del estado excitado no se puede medir con precisión ya que solo se tiene un tiempo finito para realizar la medición.

De modo que: $\Delta E = \frac{h/4\pi}{\Delta t} = \frac{(4.135\times10^{-15}\ eV\cdot s)}{4\pi\times10^{-8}\ s} \simeq 3.3 \times\ 10^{-8}\ eV$.

(d) $\Delta E/E = h\Delta\nu/h\nu \Rightarrow E = \Delta E/(\Delta\nu/\nu) = (3.3 \times\ 10^{-8}\ eV)/(1.6 \times 10^{-8}) = 2.1\ eV$. ■

Ejemplo II.6.3 Considere una partícula microscópica que se mueve libremente a lo largo del eje X. Suponga que en el instante $t = 0$, se mide la posición de la partícula con un incertidumbre Δx_0. Calcule la incertidumbre en la posición de la partícula a un tiempo t posterior.

Solución: La incertidumbre en el impulso de la partícula, a $t = 0$, es al menos: $\Delta p_x = \hbar/2\Delta x_0$.

Por lo tanto, la velocidad de la partícula, en ese instante, será incierta por lo menos: $\Delta v = \Delta p_x/m = \hbar/2m\Delta x_0$,

Así que, entonces la distancia x que viajó la partícula, en el tiempo t no podrá conocerse con mayor precisión que: $\Delta x = t\Delta v = \hbar t/2m\Delta x_0$. Obsérvese que Δx es inversamente proporcional a Δx_0, de modo que entre más localizada esté la partícula en el instante inicial, será menos lo que se pueda saber de su posición final. ■

Difracción en dos ranuras (experimento de Young): Considérese el experimento de interferencia de luz por dos ranuras o rendijas. Desde el punto de vista ondulatorio, la onda original es dividida en dos frentes de onda coherentes por las rendijas, y el traslape de estos es lo que produce las franjas de interferencia en la pantalla, que son características del fenómeno ondulatorio. Ahora supóngase que se sustituye la pantalla por una superficie fotoeléctrica. Si se mide el lugar de la superficie donde son emitidos los fotoelectrones, se obtiene un patrón de intensidades correspondiente al de dos rendijas presentándose así, aparentemente, aspectos ondulatorios. Sin embargo, si se miden las distribuciones de energía y el tiempo de los fotoelectrones emitidos se obtiene evidencia que demuestra que la radiación consiste de fotones, de modo que los aspectos corpusculares parecen estar presentes. Pero, cada fotón deberá pasar por una u otra rendija. ¿Cómo es posible que su movimiento más allá de las rendijas sea influenciado por la interacción de sus ondas asociadas con una rendija por la cual no paso?

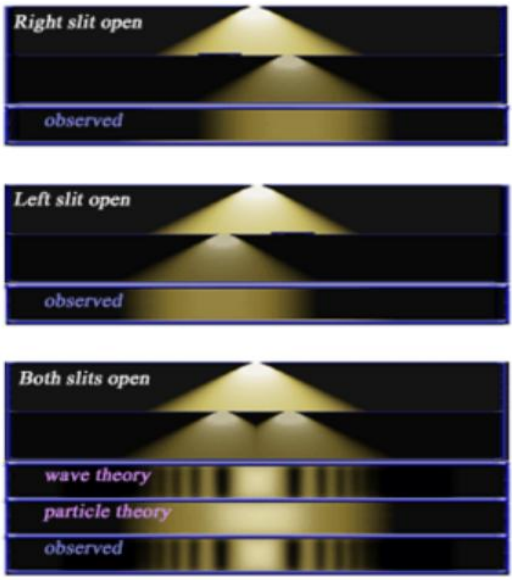


Figura II.6.1: Experimento de Young.

El error en el razonamiento de la paradoja anterior se encuentra en la afirmación de que el fotón debe pasar por una u otra rendija. ¿Cómo puede determinarse realmente si un fotón que se detecta en la pantalla pasa por una de las rendijas en particular? Para poderlo hacer sería necesario colocar un detector en cada rendija, pero el detector que interacciona con el fotón en la rendija lo saca de la trayectoria que de otra forma seguiría. Por el principio de incertidumbre, se puede demostrar que un detector que posea suficiente resolución espacial como para determinar por cual rendija pasa el fotón, perturba tanto su impulso que destruye el patrón de interferencia por dos rendijas. Por tanto, se llega a la conclusión de que se puede observar el comportamiento ondulatorio o corpuscular de la radiación, en el experimento. Sin embargo, el principio de incertidumbre impide que se observen ambos al mismo tiempo para sistemas "pequeños".

Oscilador armónico unidimensional: El oscilador armónico cuántico es el análogo mecánico cuántico del oscilador armónico clásico. En el problema del oscilador armónico unidimensional, una partícula de masa m está sometida a un potencial cuadrático $V(x) = kx^2/2$. En Mecánica Clásica $k = m\omega^2$ se denomina constante de fuerza o constante elástica, y depende de la masa m de la partícula y de la frecuencia angular ω.

El Hamiltoniano cuántico de la partícula es: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$, donde $\hat{x}$ es el operador posición y $\hat{p}$ es el operador momento: $\left(\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}\right)$. Empleando como estimación: $\Delta x\Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \Longrightarrow \Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$.

Así la energía total es: $\langle E\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle \approx \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4}$.

Minimizando la energía: $\frac{dE}{\Delta x} = -\frac{\hbar^2}{4m(\Delta x)^3} + m\omega^2\Delta x = 0 \implies (\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \therefore E = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2} = E_0$.

Como se puede observar el valor obtenido corresponde al punto cero del oscilador armónico, de modo que el valor así obtenido es el correcto, para este estado.

Partícula en un pozo: Una partícula se encuentra confinada en un pozo infinito de anchura $2a$. Las únicas posiciones posibles de la partícula se encuentran dentro del pozo así que: $\Delta x\Delta p \approx \hbar \implies \Delta x \approx a \Longrightarrow \Delta p \approx \frac{\hbar}{a}$.

La energía cinética será por tanto: $\langle E\rangle = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} = \frac{4}{\pi^2}E_1$.

Como se observa el resultado obtenido difiere en un factor algo superior a 2 del valor real, pero de nuevo el orden de magnitud es el correcto. Este cálculo da una idea de las energías que hay que aportar para confinar una cierta partícula en una región, tal como puede ser un nucleón en el núcleo.

Energía de una partícula en un potencial colombiano: A continuación, se estima la energía fundamental de un átomo mono electrónico. Por el principio de indeterminación: $\Delta x\Delta p \geq \hbar/2$. Empleando como estimación que para el nivel fundamental se cumple: $\Delta r\Delta p \approx \hbar \implies \Delta p \approx \hbar/\Delta r$. La energía total es:

$$\langle E\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = \left\langle\frac{p^2}{2m_e}\right\rangle - \left\langle\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right\rangle \approx \frac{\hbar^2}{2m_e(\Delta r)^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\Delta r}$$

En el nivel fundamental la energía es mínima: $\frac{dE}{\Delta r} \approx -\frac{2\hbar^2}{2m_e(\Delta r)^3} + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0(\Delta r)^2} = 0 \implies \Delta r = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e Ze^2} = a_0$.

Donde a_0 es el radio de Bohr, sustituyendo en la estimación para la energía se obtiene: $E = -\frac{(Ze^2)^2 m_e}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} = E_0$.

Que es exactamente la energía del estado fundamental de un átomo hidrogenoide.

PROBLEMAS: Principio de Incertidumbre

1. Una bala de 40 g viaja a $1000\ m/s$. (a) ¿Qué longitud de onda se le puede asociar? (b) ¿Por qué no se revela la naturaleza ondulatoria de la bala por medio de efectos de difracción?

Solución: (a) La onda de De Broglie asociada a la bala tiene una longitud de onda:

$$\lambda_B = \frac{h}{mv} = \frac{6.626\cdot10^{-34}\ J\cdot s}{(0.04\ kg)\times(1000\ m/s)} = 1.656\ \times 10^{-35}\ m.$$

(b) Para que se dé el fenómeno de difracción se requiere que el obstáculo (barrera, rendija, etc.) por el que se hace pasar una onda sea del orden de magnitud de la longitud de onda. Para la bala no podrá existir tal cosa pues su longitud de onda es mucho más pequeña que cualquiera de sus átomos componentes. ■

2. ¿Es posible medir la energía y el momento de una partícula simultáneamente con precisión arbitraria?

Solución: Si E y p se van han de medir simultáneamente sus operadores deben conmutar: $[A,B] = AB - BA$. De modo que si:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V \ y\ \hat{p} = -i\hbar\nabla;$$

Entonces, $\left[\widehat{H},\hat{p}\right] = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V\ , -i\hbar\nabla\right] = \frac{i\hbar^3\nabla^2\nabla}{2m} - i\hbar V\nabla - \frac{i\hbar^3\nabla\nabla^2}{2m} + i\hbar\nabla V$; ya que $\nabla^2\nabla = \nabla\nabla^2$,

se tiene que: $\left[\widehat{H},\hat{p}\right] = -i\hbar(V\nabla - V\nabla)$. Así que si $V = cte.$ el conmutador se anula.

Así que la energía y el momento solo pueden medirse simultáneamente con precisión arbitraria en al caso de partículas no ligadas. ■

4. (a) Usar el principio de incertidumbre para estimar el orden de magnitud de la energía cinética (en eV) de un electrón en el átomo de hidrógeno. (b) Estimar la energía cinética (en MeV) de un neutrón confinado en un núcleo de diámetro de $10\ fm = 10^{-15}\ m$.

Solución: (a) Suponiendo que $\Delta x\Delta p\ \approx \hbar$, entonces $c\Delta p\ \approx \frac{\hbar c}{\Delta x} = \frac{(6.582\times10^{-16}\ eV\cdot s)\times\left(3\times10^{8}\frac{m}{s}\right)}{0.529\times10^{-10}\ m} = 3{,}732\ eV.$

Así que: $T = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{1}{2}\frac{c^2p^2}{m_ec^2} = \frac{1}{2}\times\frac{(3{,}732\ eV)^2}{0.510\times10^6 eV} = 13.654\ eV$, habiendo tomado: $m_e = 0.510\ MeV/c^2$.

(b) Análogamente al caso anterior se tiene: $c\Delta p\ \approx \frac{\hbar c}{\Delta x} = \frac{(6.582\times10^{-16}\ eV\cdot s)\times\left(3\times10^{8}\frac{m}{s}\right)}{10^{-15}\ m} = 19.746\ MeV$

Así que: $T = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{1}{2}\frac{c^2p^2}{m_nc^2} = \frac{1}{2}\times\frac{(19.746\ MeV)^2}{939.565\ MeV} = 20.749\ MeV$, habiendo tomado: $m_n = 939.565\ MeV/c^2$. ■

5. La determinación de la posición de un electrón con una precisión de 0,01 Å es más que razonable. En estas condiciones, calcular la indeterminación de la medida simultánea de la velocidad del electrón.

Solución: Considerando: $\Delta x\Delta p_x = \Delta x\Delta(m_ev)\ \geq\ \hbar/2$, y suponiendo la masa del electrón bien definida.

Se tiene entonces: $\Delta v \geq \frac{\hbar}{2m_e\Delta x} = \frac{1.054\times10^{-34}J\cdot s}{2\times(9.109\times10^{-31}\ kg)\times(0{,}01\times10^{-10}m)} = 5.785\times10^7 m/s$.

La indeterminación en la medida de la velocidad del electrón es del mismo orden, o mayor, que las propias velocidades típicas de estas partículas. ■

III. Mecánica Cuántica

III.1 Fundamentos I

Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

En la mecánica cuántica, la función Ψ corresponde a la variable movimiento ondulatorio en general; no es una cantidad mesurable en sí misma y puede ser compleja, $\Psi \in \mathbb{C}$. Así que, en una variable, se puede escribir como:

$$\Psi(x,t) = Ae^{-i\omega(t-x/v)} = A\left[\cos\omega\left(\frac{x}{v}-t\right) + i\sin\omega\left(\frac{x}{v}-t\right)\right] \qquad \textbf{[III.1.1]}$$

Cuando se sustituye en esta fórmula ω por $2\pi\nu$ y v por $\lambda\nu$, se obtiene:

$$\Psi = Ae^{-i2\pi(\nu t - x/\lambda)} \qquad \textbf{[III.1.2]}$$

Lo cual es conveniente, ya que ν y λ están en función de la energía total $E = h\nu = 2\pi\hbar\nu$ y del momentum $p = \frac{h}{\lambda} = 2\pi\hbar/\lambda$ de la partícula descrita por la función Ψ. Así entonces, se puede escribir:

$$\Psi = Ae^{-(i/\hbar)(Et-px)} \qquad \textbf{[III.1.3]}$$

Esta ecuación es la descripción matemática de una onda equivalente a una partícula libre, de energía total E y momentum p, que se mueve en la dirección y sentido $+X$.

Pero para el caso de un electrón que se encuentra ligado a un átomo por al campo eléctrico de su núcleo se requiere una ecuación diferencial fundamental para Ψ apropiada.

Para ello, se procede a diferenciar dos veces la ecuación **[III.1.3]** respecto de x y una vez respecto de t:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi, \qquad \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\Psi \qquad \textbf{[III.1.4]}$$

A velocidades pequeñas comparadas con la de la luz, la energía total E de una partícula es la suma de la energía cinética $p^2/2m$ y de su energía potencial V, donde V en general es una función de la posición x y del tiempo t:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t) \qquad \textbf{[III.1.5]}$$

Multiplicando ambos miembros de esta ecuación por la función de onda ψ, se tiene:

$$E\Psi = \frac{p^2\Psi}{2m} + V(x,t)\Psi \qquad \textbf{[III.1.6]}$$

De las ecuaciones **[III.1.4]** se ve que $E\Psi = -(\hbar/i)(\partial\Psi/\partial t)$ y $p^2\Psi = -\hbar^2(\partial^2\Psi/\partial x^2)$, sustituyendo estas expresiones en la ecuación **[III.1.6]** se obtiene:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi \qquad \textbf{[III.1.7]}$$

Que se conoce como la *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*; y en tres dimensiones toma la forma:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z,t)\Psi \qquad \textbf{[III.1.8]}$$

La ecuación de Schrödinger no se puede derivar de primeros principios, representa en sí un primer principio.

Función de onda (interpretación):

Se han presentado evidencias experimentales que demuestran que las partículas de sistemas microscópicos también se mueven de acuerdo a las leyes del movimiento ondulatorio. Por lo que una partícula microscópica actúa como si en ciertos aspectos de su comportamiento estuviera gobernado por el de una onda asociada de De Broglie o una función de onda. La ecuación de Schrödinger expresa este hecho.

Sin embargo, debido a que la función de onda Ψ de la ecuación de Schrödinger es una función compleja, $\Psi \in \mathbb{C}$, no puede interpretarse a partir de esta el comportamiento físico "real" de una partícula debido precisamente a la parte compleja. Las magnitudes físicas solo pueden tener valores reales medibles.

La conexión básica entre las propiedades de la función de onda $\Psi(x,t)$ y el comportamiento de la partícula asociada está expresada en términos de la función de *densidad de probabilidad* $P(x,t) \in \mathbb{R}$. Esta cantidad especifica la probabilidad, por unidad de longitud del eje X de encontrar la partícula en la vecindad de la coordenada x al tiempo t. Donde,

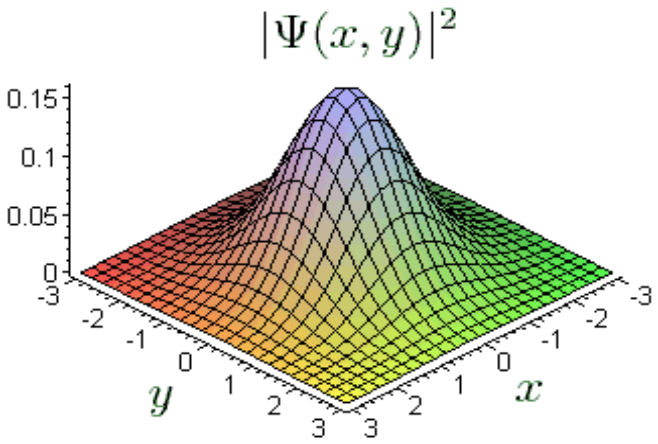


Figura III.1.1: Densidad de probabilidad en dos dimensiones.

$$P(x,t)dx \equiv |\Psi(x,t)|^2 dx \equiv \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx \qquad \textbf{[III.1.9]}$$

El símbolo $\Psi^*(x,t)$, representa el *complejo conjugado* de $\Psi(x,t)$. Así $P(x,t)dx$ es la probabilidad de encontrar a la partícula en una coordenada $x \in [x, x+dx]$.

El principio de incertidumbre provee la razón fundamental por la cual la mecánica cuántica se expresa en probabilidades y sus predicciones son estadísticas y no en certidumbres deterministas.

Ejemplo III.1.1 Demostrar que $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ es necesariamente real y positiva o cero.

Solución: Sean $\Psi(x,t) \equiv R(x,t) + iI(x,t)$ y $\Psi^*(x,t) \equiv R(x,t) - iI(x,t)$;

$$\Rightarrow\ \Psi^*\Psi = (R-iI)(R+iI) = R^2 - i^2I^2 = R^2 + I^2\ \ \therefore\ \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = [R(x,t)]^2 + [I(x,t)]^2 \geq 0.$$

Que es igual a la suma de los cuadrados de dos función reales por lo que también es real y positiva o cero. ■

En la ecuación de Schrödinger, la energía potencial V de una partícula generalmente es función de x y posiblemente de t. Sin embargo, un caso importante es cuando $V(x,t) = V_0 = cte.$, que es el caso de la partícula libre ya que la fuerza que actúa sobre la partícula está dada por $F = -dV(x,t)/dx$, lo cual produce $F = 0$ si $V(x,t) = V_0$. En este caso la ley de Newton del movimiento afirma que el impulso lineal p será constante y también se sabe que su energía total Eserá constante. Aquí se tiene la situación de la partícula libre con valores constantes de $\lambda = h/p$ y $\nu = E/h$.

Cabe mencionar que, no es posible esperar que la ecuación de Schrödinger sea válida cuando se aplica a partículas que se mueven a velocidades relativistas. Esto es así, ya que la ecuación es congruente con la ecuación **[III.1.5]** que es la ecuación de energía clásica y que es incorrecta para velocidades comparables con la de la luz. Dirac desarrolló una teoría relativista de la mecánica cuántica utilizando esencialmente los mismos postulados de la teoría de Schrödinger, pero sustituyó la ecuación de energía total por su análogo relativista: $E = \sqrt{(m_0c^2)^2 + c^2p^2} + V$. Y por supuesto que se reduce a la teoría de Schrödinger a bajas velocidades.

Propiedades:

La función $\Psi(x,t)$ es una forma de representar el estado físico de un sistema de partículas, usualmente es una función compleja, finita, de cuadrado integrable y univaluada de las coordenadas espaciales de cada una de las partículas. También deber ser lineal; es decir que, si $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ son soluciones para una energía potencial dada V, entonces: $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$, también es solución.

La función de densidad de probabilidad es una función que siempre debe *normalizarse*; es decir, debe dar la probabilidad total de encontrar a la partícula asociada, si es que existe, en algún lugar sobre el eje X, y esta probabilidad debe ser siempre igual a uno:

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx = \frac{1}{N}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = 1. \qquad \textbf{[III.1.10]}$$

Dependiendo de la función de onda $\Psi(x,t)$ que se tenga, será necesario encontrar el número $1/N$ que *normaliza* la función, de manera que la probabilidad total sea siempre uno.

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

En muchas situaciones, la energía potencial de una partícula no depende explícitamente del tiempo; las fuerzas que actúan sobre ella y, por tanto, V, varían solamente con la posición de la partícula. Cuando esto se cumple, la ecuación de Schrödinger se puede simplificar eliminando todo lo referente a t.

La función de onda unidimensional de una partícula libre se puede escribir como:

$$\Psi(x,t) = Ae^{-(i/\hbar)(Et-px)} = Ae^{-(iE/\hbar)t}e^{(ip/\hbar)x} = \psi e^{-(iE/\hbar)t} \qquad \textbf{[III.1.11]}$$

Esto es, el producto de una función dependiente del tiempo $e^{-(iE/\hbar)t}$ y una función dependiente de la posición $\psi = \psi(x)$. Sucede que las variaciones con el tiempo de *todas* las funciones de partículas, sobre las que actúan fuerzas estacionarias, tienen la misma forma que las de una partícula libre.

Sustituyendo la función $\Psi(x,t) = \psi e^{-(iE/\hbar)t}$ en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$E\psi e^{-(iE/\hbar)t} = -\frac{\hbar^2}{2m}e^{-(iE/\hbar)t}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi e^{-(iE/\hbar)t} \qquad \textbf{[III.1.12]}$$

Y así, dividiendo ambos por el factor exponencial común se obtiene:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0 \qquad \textbf{[III.1.13]}$$

Que se conoce como *ecuación de Schrödinger en estado estacionario*; y que en tres dimensiones se escribe:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi = 0 \qquad \textbf{[III.1.14]}$$

Resolver esta ecuación significa obtener una función de onda ψ que no solo obedezca a la ecuación y a las condiciones de frontera que existan, sino que también cumpla las condiciones de una función de onda aceptable; es decir, que la función y sus primera y segunda derivadas sean continuas, finitas y univaluadas. De esta manera, la cuantización de la energía aparece en la mecánica ondulatoria como un elemento natural de la teoría.

Operadores, autovalores y autofunciones:

Cuando en un problema físico se plante la ecuación de Schrödinger con condiciones a la frontera, usualmente, los valores posibles que puede tomar la energía E_n, para los que se puede resolver la ecuación reciben el nombre de autovalores o *valores propios* y las funciones de onda correspondientes ψ_n, reciben el nombre de autofunciones o *funciones propias*. Un ejemplo de conjunto de valores propios lo constituyen los niveles discretos de energía del átomo de hidrógeno:

$$E = -\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2}; \quad n \in \mathbb{N} \qquad \textbf{[III.1.15]}$$

Por supuesto, una cantidad variable dinámica G puede no estar cuantizada. En esta caso, las mediciones de G efectuadas sobre un número de sistemas idénticos no conducirán a un resultado único, sino a un conjunto de valores cuyo promedio es el *valor probable* de la variable:

$$\langle G(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G(x)|\psi|^2 dx \qquad \textbf{[III.1.16]}$$

Por ejemplo, en el átomo de hidrógeno la posición del electrón no está cuantizada, de tal forma que debemos pensar que el electrón tiene cierta probabilidad $|\psi|^2$ por unidad de volumen de encontrarse en una región vecina al núcleo, pero con una posición y aun una órbita no predecibles en el sentido clásico. La afirmación de probabilidad no entra en conflicto con el hecho de que los experimentos llevados a cabo con el átomo de hidrógeno muestran siempre que este contiene un electrón completo. La probabilidad se refiere a la posibilidad de *encontrar* al electrón; y si bien esta probabilidad está esparcida, el electrón no lo está.

Valor medio de magnitudes físicas:

Una vez resuelta la ecuación de Schrödinger para un partícula en una situación física dada, la función de onda resultante $\Psi(x, y, z, t)$ contiene toda la información sobre la partícula permitida por el principio de incertidumbre. Excepto en el caso de variables que en algunos casos resultan ser cuantizadas, esta información es en la forma de probabilidades y no en la forma de números específicos.

Como ejemplo, calculemos el valor probable $\langle x\rangle$ de la posición de una partícula limitada al eje X que está descrita por la función de onda $\Psi(x, t)$. Este es el valor que se obtendría si se determinaran experimentalmente las posiciones de un gran número de partículas descritas por la misma función de onda en un instante t y promediáramos después los resultados.

Considérese primero la pregunta: ¿Cuál es la posición promedio $\bar{x}$ de un número de partículas distribuidas a lo largo del eje X, de manera que hay N_i partículas en el punto x_i? La posición promedio en este caso es la misma que el centro de masa de la distribución, y así:

$$\overline{x} = \frac{\sum N_i x_i}{\sum N_i} \qquad \textbf{[III.1.17]}$$

Cuando se trata de una sola partícula debe sustituirse el número N_i de partículas en x_i por la probabilidad P_i de encontrar la partícula en un intervalo dx en x_i. Esta probabilidad es:

$$P_i(x,t)dx = \Psi_i^*(x,t)\Psi_i(x,t)dx \equiv |\Psi_i|^2 dx \qquad \textbf{[III.1.18]}$$

Donde Ψ_i es la función de onda de la partícula calculada en $x = x_i$. Efectivamente, esta sustitución ha cambiado las sumas por integrales, de modo que se tiene:

$$\langle x\rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t)dx} \equiv \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2 dx} \qquad \textbf{[III.1.19]}$$

Pero Ψ debe ser una función de onda normalizada, y el denominador de la ecuación anterior vale uno, entonces:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi|^2 dx \qquad \textbf{[III.1.20]}$$

Esta fórmula establece que $\langle x \rangle$ está situada en el centro de la distribución de la función $|\Psi_i|^2$. A la cantidad $\langle x \rangle$ usualmente se le denomina *valor de expectación*, valor esperado o más probable de la coordenada x de la partícula al instante t.

Se puede seguir el mismo procedimiento para obtener el valor probable $\langle G(x) \rangle$ de cualquier cantidad; por ejemplo, la energía potencial $V(x)$, que es una función de la posición x de una partícula descrita por una función de onda Ψ. El resultado es:

$$\langle G(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G(x)|\Psi|^2 dx \qquad \textbf{[III.1.21]}$$

Esta fórmula para el valor promedio de $G(x)$ es válida aun cuando la función $G(x)$ varíe con el tiempo, debido a que $\langle G(x) \rangle$ en cualquier evento se debe de valorar en un tiempo determinado t, ya que Ψ sí es función de t.

El método descrito permite desde luego dar una evaluación cuantitativa de los términos Δx y Δp en el principio de incertidumbre. Por ejemplo, el valor de expectación del impulso está dado por:

$$\langle p \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) p \Psi(x,t) dx \qquad \textbf{[III.1.22]}$$

Sin embargo, para evaluar esta integral se debe expresar el integrando como una función de las variables x y t. Pero en la mecánica cuántica no es posible escribir p como función de x, ya que p y x no pueden conocerse simultáneamente con completa precisión. Tampoco es posible escribir p como función de t. Para resolver este problema considérese lo siguiente: Sea Ψ la función de onda de una partícula libre, entonces,

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t) \qquad \textbf{[III.1.23]}$$

Derivando respecto a x, se tiene:

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = -k \sin(kx - \omega t) + ik \cos(kx - \omega t) = ik[\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)] \qquad \textbf{[III.1.24]}$$

y como, $k = p/\hbar$, entonces,

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = i \frac{p}{\hbar} \Psi(x,t) \qquad \textbf{[III.1.25]}$$

Que se puede escribir como:

$$p[\Psi(x,t)] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}[\Psi(x,t)] \qquad \textbf{[III.1.25]}$$

Lo cual indica que existe una asociación entre la cantidad dinámica p y el *operador diferencial* $-i\hbar(\partial/\partial x)$. Esto es, aplicar este operador o multiplicar la función de onda por p es equivalente.

Análogamente, pero derivando la función de onda con respecto de t y usando el hecho de que $\omega = E/\hbar$, permite encontrar:

$$E[\Psi(x,t)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}[\Psi(x,t)] \qquad \textbf{[III.1.26]}$$

Se puede demostrar que as relaciones anteriores no están restringidas al caso de partículas libres.

PROBLEMAS: Ecuación de Schrödinger

1. Sea $\psi(x) = \frac{N}{x^2+a^2}$, calcular la constante de normalización N.

Solución: dado que: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$,

Entonces, $N^2 \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 + a^2)^{-2} dx = 1$. Haciendo $x = a\,tan\,\theta \quad \Rightarrow \quad dx = a\,sec^2\,\theta\,d\theta$. ´

Así que, $N^2 \int_0^{\pi/2} (a^2\,tan^2\,\theta + a^2)^{-2} a\,sec^2\,\theta\,d\theta = N^2 a^{-3} \int_0^{\pi/2} \frac{sec^2\,\theta}{(tan^2\,\theta+1)^{-2}} d\theta = 1$;

pero, $1 + tan^2 x = sec^2 x$; entonces, $N^2 a^{-3} \int_0^{\pi/2} cos^2\,\theta\,d\theta = N^2 a^{-3}[(1/2)\theta + (1/4)\,sen\,2\theta]_0^{\pi/2} = 1$

Así que, $N^2 a^{-3}(\pi/4) = \frac{\pi N^2}{4a^3} = 1$; de modo que $N = \sqrt{\frac{4a^3}{\pi}}$. ■

2. Demuestre que postular que: $p \leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ y $E \leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, equivale a postular la ecuación de Schrödinger.

Solución: Considérese la ecuación: $E = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$.

Al sustituir las cantidades p y E por sus diferentes operadores diferenciales asociados, se tiene:

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + V(x,t)$; ya que $(-i\hbar)^2 = -\hbar^2$ y $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)$.

Que es una *ecuación de operadores*, que obtiene significado cuando se la aplica a cualquier función de onda.

Así, $i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)$ resulta ser justamente la ecuación de Schrödinger. ■

3. Calcule el valor de expectación (a) para el impulso, (b) para la energía.

Solución: (a) $\Rightarrow \langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)p\Psi(x,t)dx$ y sustituyendo p en el integrando por $-i\hbar(\partial/\partial x)$, se obtiene:

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x,t)dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}dx$$

que es una expresión integrable de inmediato si se conoce $\Psi(x,t)$.

(b) De manera análoga, $\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)E\Psi(x,t)dx$ y sustituyendo E en el integrando por $i\hbar(\partial/\partial t)$:

$$\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi(x,t)dx = i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}dx$$

Pero también podría sustituirse por: $E = -\frac{p^2}{2m} + V(x,t)$, para escribir E en términos de p y V,

de modo que: $\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right)\Psi(x,t)dx$. ■

III.2 FUNDAMENTOS II

Aplicaciones a casos sencillos:

Partícula Libre: La ecuación de Schrödinger más simple es aquella en la que el potencial es constante; $V(x) = cte$. Una partícula que se mueve bajo la acción de tal potencial es una *partícula libre* ya que la fuerza que actúa sobre ella es nula, sí ya que $F = -dV(x)/dx = 0$. Como esto es cierto, sin importar el valor de la constante, sin pérdida de generalidad se elige igual a cero; esto es, $V(x) = 0$. En tales condiciones la partícula debe estar en reposo o con un movimiento con impulso $p = cte$. En cualquier caso, su energía E también será constante.

Para encontrar el movimiento predicho por la mecánica cuántica de tal situación, se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, haciendo $V(x) = 0$, así entonces:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) \qquad \textbf{[III.2.1]}$$

Los valores propios E son iguales a la energía total de la partícula. Las soluciones de esta ecuación son las funciones propias $\psi(x)$, y las funciones de onda son entonces de la forma, $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$, o bien:

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i\sin(kx - \omega t) = e^{i(kx-\omega t)} = e^{ikx}e^{-i\omega t} = e^{ikx}e^{-iEt/\hbar} \qquad \textbf{[III.2.2]}$$

Ya que el número de onda y la frecuencia angular son: $k = p/\hbar = \sqrt{2mE}/\hbar$ y $\omega = E/\hbar$. De modo que:

$$\psi(x) = e^{ikx} \qquad \textbf{[III.2.3]}$$

Es decir que, esta exponencial compleja es una función propia de una partícula libre que corresponde al valor propio E. Es fácil ver que también, por sí misma, es solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con potencial nulo, $V(x) = 0$. La parte real de esta función representa una onda viajera en la dirección $+X$, pero para el mismo valor de E existe otra función cuya parte real representará una onda que se desplaza en sentido $-X$. De modo que una solución general, vendrá dada por la combinación de estas dos:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \textbf{[III.2.4]}$$

Donde A y B son constantes arbitrarias.

Para dar una interpretación física de los resultados anteriores, considérese el caso de una onda y su partícula asociada viajan en la dirección $+X$. Así se tiene que: $\psi(x) = Ae^{ikx}$ y $\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$.

Entonces, el valor de expectación del impulso p esta dado por:

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)p\Psi(x,t)dx \qquad \textbf{[III.2.5]}$$

donde el operador para el impulso es: $p_{op} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$;

de modo que, $p_{op}\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}Ae^{i(kx-\omega t)} = -i\hbar(ik)Ae^{i(kx-\omega t)} = \hbar k\Psi = \sqrt{2mE}\Psi$. Así se tiene que:

$$\langle p\rangle = \int_{-L/2\to-\infty}^{L/2\to\infty}\Psi^*\sqrt{2mE}\Psi dx = \sqrt{2mE}\int_{-L/2\to-\infty}^{L/2\to\infty}\Psi^*\Psi dx = \sqrt{2mE} \qquad \textbf{[III.2.6]}$$

Que es exactamente el impulso esperado para una partícula que se mueve en la dirección $+X$; y como su momento p está bien determinado su incertidumbre en la posición es $|\Delta x| \to L$. Los límites de integración deben hacerse finitos, $\pm L/2 \to \pm\infty$, para permitir la normalización y evitar que $A^*A = 0$.

Barreras de Potencial:

Cálculo de la transmitancia, T, y reflexión, R, para los diferentes casos, $E < V_0$ y $E > V_0$, en el potencial escalón y en la barrera de potencial.

Potencial escalón: Considérese una partícula cargada de masa m y energía total E que se mueve a lo largo de un eje X con dos electrodos, separados por una brecha muy pequeña, y que se mantienen a voltajes diferentes. De modo que, si $x_0 = 0$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < x_0 = 0 \\ V_0 & \text{si } x \geq x_0 = 0 \end{cases} \qquad \textbf{[III.2.7]}$$

Entonces se tienen dos casos: $E < V_0$ y $E > V_0$.

Caso $E < V_0$: Una partícula que se mueve en estas condiciones será reflejada por el potencial escalón.

Entonces, usando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$$

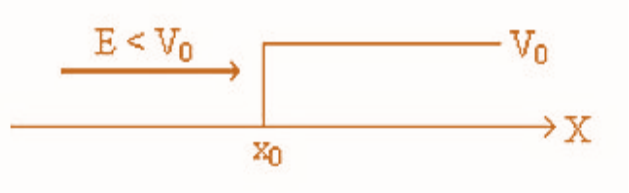


Figura III.2.1: Potencial escalón con $E < V_0$.

Se puede plantear para cada una de las regiones una ecuación,

para la región I, en que $x < 0$:

$$\psi_I'' + k^2\psi_I = 0; \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \textbf{[III.2.8]}$$

y para la región II, en que $x > 0$:

$$\psi_{II}'' + q_<^2\psi_{II} = 0; \qquad q_<^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \qquad \textbf{[III.2.9]}$$

La ecuación **[III.2.8]** corresponde a la ecuación para la partícula libre, de modo que tiene por solución:

$$\psi_I = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}; \qquad x < 0 \qquad \textbf{[III.2.10]}$$

Lo cual expresa que hay una componente que se mueve en la dirección $+X$ y una componente, reflejada, que se mueve en la dirección $-X$.

Para la ecuación **[III.2.9]** se puede plantear la solución general:

$$\psi_{II} = Ce^{q_< x} + De^{-q_< x}; \qquad x < 0 \qquad \textbf{[III.2.11]}$$

Como el primer término de la solución, $Ce^{q_< x}$ crecerá sin límites a medida que $x \to \infty$, y no es físicamente razonable, para prevenir este hecho, se elige la constante $C = 0$.

Para que ψ_I y ψ_{II} constituyan una solución continua se requiere que en $x = 0$ se satisfagan la condición de continuidad para las funciones solución y su primera derivada:

$$\begin{aligned} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} &= De^{-q_< x}; \quad x = 0 \\ ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx} &= -qDe^{-q_< x}; \quad x = 0 \end{aligned} \qquad \textbf{[III.2.12]}$$

Es decir:

$$A + B = D \quad \text{y} \quad ik(A - B) = -q_< D \quad \Rightarrow \quad A = \frac{D}{2}\left(1 + \frac{iq_<}{k}\right) \quad \text{y} \quad B = \frac{D}{2}\left(1 - \frac{iq_<}{k}\right) \qquad \textbf{[III.2.13]}$$

de modo que:

$$\psi_I = \frac{D}{2}\left(1+\frac{iq_<}{k}\right)e^{ikx} + \frac{D}{2}\left(1-\frac{iq_<}{k}\right)e^{-ikx}; \qquad x \le 0$$
$$\psi_{II} = De^{-q_< x}; \qquad x \ge 0 \qquad \text{[III.2.14]}$$

La constante arbitraria D, determina la amplitud de las funciones propias ψ_1 y ψ_2, y no requiere calcularse pues la solución admite cualquier valor para esta. La función de onda correspondiente es:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} Ae^{ikx}e^{-iEt/\hbar} + Be^{-ikx}e^{-iEt/\hbar} = Ae^{i(kx-Et/\hbar)} + Be^{i(-kx-Et/\hbar)}; & x \le 0 \\ De^{-q_< x}e^{-iEt/\hbar}; & x \ge 0 \end{cases} \qquad \text{[III.2.15]}$$

Para la región $x \le 0$ se el primer término se puede interpretar como una partícula asociada a una onda viajera que se desplaza en la dirección $+X$, el segundo término, en la función de onda, corresponderá a una partícula asociada a un onda que se desplaza en dirección $-X$. Esta información sumada bien puede representar a una partícula que incide en el potencial escalón y es reflejada. Así que se puede calcular el *coeficiente de reflexión*, como una cantidad relacionada con la probabilidad de que ocurra dicha reflexión y que obviamente dependerá de la relación entre A y B:

$$R = \frac{v_k B^* B}{v_k A^* A} = \frac{\frac{D}{2}\left(1-\frac{iq_<}{k}\right)^*\frac{D}{2}\left(1-\frac{iq_<}{k}\right)}{\frac{D}{2}\left(1+\frac{iq_<}{k}\right)^*\frac{D}{2}\left(1+\frac{iq_<}{k}\right)} = \frac{\left(1+\frac{iq_<}{k}\right)\left(1-\frac{iq_<}{k}\right)}{\left(1-\frac{iq_<}{k}\right)\left(1+\frac{iq_<}{k}\right)} = 1 \qquad \text{[III.2.16]}$$

Es decir, $R = 1$, de modo que la partícula siempre se refleja.

Para la región $x \ge 0$, la densidad de probabilidad es:

$$\Psi^*\Psi = D^* e^{-q_< x} e^{+iEt/\hbar} D e^{-q_< x} e^{-iEt/\hbar} = D^* D e^{-2q_< x} \qquad \text{[III.2.17]}$$

La cual decrece rápidamente conforme x crece. Sin embargo, existe una posibilidad finita de que la partícula se encuentre en la región $x > 0$. Este fenómeno se conoce como *penetración de la región clásicamente excluida*.

La penetración *no* significa que la partícula queda almacenada en la región clásicamente excluida, ya que la partícula que incide en el escalón de potencial es, en definitiva, reflejada.

La *distancia de penetración* es $\Delta x = 1/q_<$. La razón es que $e^{-2q_< x}$ se va rápidamente a cero cuando $x \gg 1/q_<$.

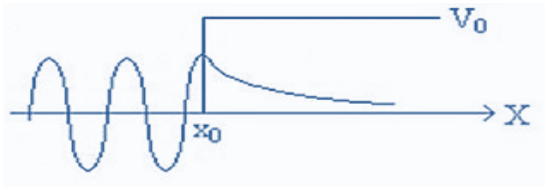


Figura III.2.2: Penetración en la región excluida.

Caso $E > V_0$: El movimiento de la partícula bajo la influencia del potencial escalón queda descrito por la función de onda:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Donde la función propia $\psi(x)$ satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial en cuestión.

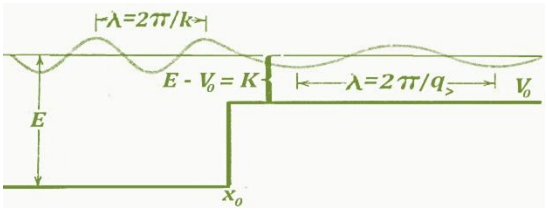


Figura III.2.3: $\lambda = h/p$ y $p = \sqrt{2mK}$.

Esta ecuación tiene diferentes formas en las regiones izquierda y derecha del potencial escalón, a saber:

para la región I, en que $x < 0$, como en el caso anterior:

$$\psi_I'' + k^2\psi_I = 0; \qquad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \text{[III.2.18]}$$

y para la región II, en que $x > 0$: $\psi_{II}'' + q_>^2\psi_{II} = 0; \qquad q_>^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$ [III.2.19]

De modo que se puede escribir la solución general de la ecuación de Schrödinger como:

$$\psi = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}; \quad x < 0. \qquad \textbf{[III.2.20]}$$

$$\psi = Ce^{iq_>x} + De^{-iq_>x}; \; x > 0.$$

Pero $D = 0$, ya que en esa región el flujo de partículas es sólo hacia la derecha. De las ecuaciones de continuidad en $x = 0$ se tiene:

$$B = \frac{k - q_>}{k + q_>}A; \quad C = \frac{2k}{k + q_>}A = A + B. \qquad \textbf{[III.2.21]}$$

De modo que:

$$\psi = A\left[e^{ikx} + \frac{k-q_>}{k+q_>}e^{-ikx}\right]; \; x \leq 0 \quad \text{y} \quad \psi = A\frac{2k}{k+q_>}e^{iq_>x}; \; x \geq 0. \qquad \textbf{[III.2.22]}$$

La constante A determina la amplitud de la función propia, y como antes no requiere calcularse. El primer término de la ecuación para la región $x \leq 0$ representa una onda incidente y el segundo una onda reflejada.

La relación de la intensidad de la onda reflejada a la intensidad de la onda incidente proporciona la probabilidad de que la partícula sea reflejada por el escalón de potencial.

Puesto que la probabilidad por segundo de que la partícula cruce un punto dado es proporcional a la distancia que viaja por segundo, el flujo de probabilidad es proporcional, no solo a la intensidad de la onda, sino también a la velocidad de la partícula asociada.

Así pues, en sentido estricto, la mencionada probabilidad está dada por el *coeficiente de reflexión* R:

$$R = \frac{v_k B^* B}{v_k A^* A} = \frac{\left(A\frac{k-q_>}{k+q_>}\right)^*\left(A\frac{k-q_>}{k+q_>}\right)}{A^*A} = \frac{A^2\left(\frac{k-q_>}{k+q_>}\right)^2}{A^2} = \left(\frac{k-q_>}{k+q_>}\right)^2 < 1 \qquad \textbf{[III.2.23]}$$

Donde la velocidad para ambas componentes es: $v_k = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m}$.

Ahora bien, para la región $x \geq 0$ lo que se tiene es una onda viajera transmitida. Análogamente, la probabilidad de que la partícula se transmita estará en relación a las intensidades de la onda incidente y transmitida, y sus velocidades correspondientes.

$$T = \frac{v_q C^* C}{v_k A^* A} = \frac{v_q}{v_k}\frac{\left(A\frac{2k}{k+q_>}\right)^*\left(A\frac{2k}{k+q_>}\right)}{A^*A} = \frac{\hbar q/m}{\hbar k/m} \times \frac{A^2\left(\frac{2k}{k+q_>}\right)^2}{A^2} = \frac{4kq}{(k+q_>)^2} \qquad \textbf{[III.2.24]}$$

Finalmente, se tiene la siguiente relación entre el coeficiente de reflexión y el de transmisión:

$$1 = R + T \qquad \textbf{[III.2.25]}$$

$\therefore$ *flujo incidente = flujo reflejado + flujo transmitido*

Si $E < V_0 \Rightarrow R = 1$.

Si $E > V_0$, los coeficientes de reflexión y transmisión, R y T, están dados por la relación E/V_0. En la figura se muestra una variación continua de los coeficientes en función de la cantidad E/V_0. Para que la reflexión se anule se requiere que la energía sea muy grande en comparación con el potencial.

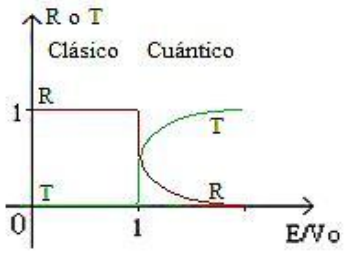


Figura III.2.4: Reflexión y transmisión.

Barrera de Potencial: Considérese un potencial de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0, \quad x > a \\ V_0 & \text{si } x > 0, \quad x < a \end{cases} \qquad \text{[III.2.26]}$$

Caso $E < V_0$: Una partícula se mueve desde la región I, donde $x < 0$ en dirección $+X$. Las ecuaciones que describen su comportamiento en cada una de las regiones de potencial son:

$$\text{I} : \psi_I'' + k^2\psi_I = 0 \Rightarrow \psi_I = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

$$\text{II} : \psi_{II}'' + q_<^2\psi_{II} = 0 \Rightarrow \psi_{II} = A_2 e^{q_< x} + B_2 e^{-q_< x}$$

$$\text{III} : \psi_{III}'' + k^2\psi_{III} = 0 \Rightarrow \psi_{III} = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$$

Donde nuevamente, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ y $q_<^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$.

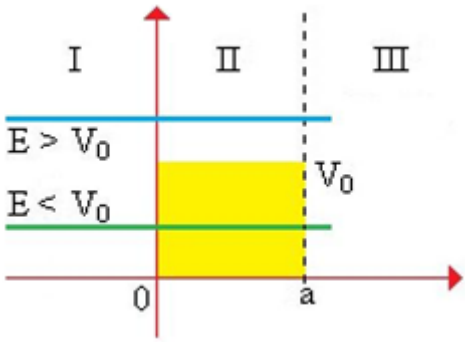


Figura III.2.5: Barrera de potencial.

La condición inicial implica que $B_3 = 0$.

Caso $E > V_0$: análogamente, las funciones propias son:

$$\text{I} : \psi_I'' + k^2\psi_I = 0 \Rightarrow \psi_I = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$$

$$\text{II} : \psi_{II}'' + q_>^2\psi_{II} = 0 \Rightarrow \psi_{II} = A_2 e^{iq_> x} + B_2 e^{-iq_> x} \qquad \text{[III.2.27]}$$

$$\text{III} : \psi_{III}'' + k^2\psi_{III} = 0 \Rightarrow \psi_{III} = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$$

Donde nuevamente, $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ y $q_>^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$, debe notarse que en este caso las exponenciales en la región II son complejas y no reales como en el caso anterior. También se tiene la condición inicial que implica $B_3 = 0$.

Para encontrar los coeficientes de reflexión R y de transmisión T, considérese primero el caso $E < V_0$:

Al acoplar las funciones propias y sus derivadas en los puntos $x = 0$ y $x = a$, se obtienen cuatro ecuaciones en las constantes arbitrarias A_1, B_1, A_2, B_2 y A_3, que se pueden evaluar en función de una de ellas, digamos A_1, que determinará la amplitud de las funciones propias y que puede ser arbitraria. Aunque, en la región de la barrera de potencial, la amplitud de función de onda decrece exponencialmente.

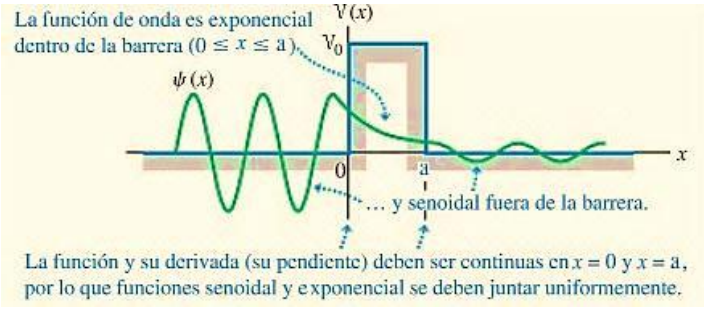


Figura III.2.6: Función de densidad de probabilidad $|\Psi(x,t)|^2$ para la situación de penetración en la barrera de potencial.

Como en el caso anterior, a partir de las condiciones de continuidad para ψ y ψ' se obtiene que:

$$T = \frac{v_k A_3^* A_3}{v_k A_1^* A_1} = 1 - R = \left[1 - \frac{1}{4}\left(\frac{k}{q_<} - \frac{q_<}{k}\right)^2 \sinh^2 q_< a\right]^{-1} \qquad \text{[III.2.28]}$$

Para cualquier valor de $E \ni 0 < E < V_0 \Rightarrow 0 < T < 1$.

Así, en este caso se tiene una transmisión parcial del haz a través de la barrera: "*efecto túnel*". La longitud de onda a ambos lados de la barrera será la misma: $\lambda = 2\pi/k$, pero su amplitud será menor en la región III.

Ejemplo III.2.1 Obtener, usando las condiciones de continuidad el coeficiente de transmisión para una partícula que se mueve desde $x < 0$ en dirección $+X$ e incide en una barrera de potencial de ancho a; $E < V_0$.

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0, \quad x > a \\ V_0 & \text{si } x > 0, \quad x < a \end{cases}$$

Solución:

$x = 0$: $A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad \Rightarrow \quad A_1 = A_2 + B_2 - B_1$

$A_1 - B_1 = \frac{q}{ik}[A_2 - B_2] \quad \Rightarrow \quad A_1 = \frac{q}{ik}[A_2 - B_2] + B_1$

$$2A_1 = \frac{q}{ik}[A_2 - B_2] + A_2 + B_2 = A_2\left(1 + \frac{q}{ik}\right) + B_2\left(1 - \frac{q}{ik}\right)$$

$$\boldsymbol{A_1 = \frac{1}{2k}A_2(k - iq) + B_2(k + iq)}$$

$x = a$: $A_2 e^{qa} + B_2 e^{-qa} = A_3 e^{ika} \quad \Rightarrow \quad A_3 \equiv A_3 e^{ika} = A_2 e^{qa} + B_2 e^{-qa}$

$q[A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa}] = ik\, A_3 e^{ika} \quad \Rightarrow \quad A_3 \equiv A_3 e^{ika} = \frac{q}{ik}[A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa}]$

Igualando ambas ecuaciones $\quad \Rightarrow \quad A_2 e^{qa} + B_2 e^{-qa} = \frac{q}{ik}[A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa}]$

$$0 = \frac{q}{ik}[A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa}] - A_2 e^{qa} - B_2 e^{-qa} = A_2 e^{qa}\left(\frac{q}{ik} - 1\right) - B_2 e^{-qa}\left(\frac{q}{ik} + 1\right)$$

$$B_2 e^{-qa}\left(\frac{q}{ik} + 1\right) = A_2 e^{qa}\left(\frac{q}{ik} - 1\right) \Rightarrow B_2 = A_2 e^{2qa}\left(\frac{q}{ik} - 1\right)/\left(\frac{q}{ik} + 1\right) = A_2 e^{2qa}(-iq - k)/(k - iq)$$

$$\boldsymbol{B_2 = -A_2 e^{2qa}(k + iq)/(k - iq)}$$

Sustituyendo este resultado en las ecuaciones para A_1 y A_3:

$$A_1 = \frac{1}{2k}A_2[(k - iq)^2 - e^{2qa}(k + iq)^2]/(k - iq)$$

$$A_3 = A_2 e^{qa}[1 - (k + iq)/(k - iq)] = A_2 e^{qa}\left[\frac{(k-iq)}{(k-iq)} - \frac{(k+iq)}{(k-iq)}\right] = A_2 e^{qa}\left[\frac{-2iq}{k-iq}\right]$$

Escribiendo A_2 en función de A_3 y sustituyendo en A_1:

$$\boldsymbol{A_2 = A_3 e^{-qa}\left[\frac{k-iq}{-2iq}\right]}$$

$$A_1 = \frac{1}{2k}A_2[(k - iq)^2 - e^{2qa}(k + iq)^2]/(k - iq)$$

$$\Rightarrow \quad A_1 = A_3\left[\frac{-1}{4iqk}\right][(k - iq)^2 e^{-qa} - (k + iq)^2 e^{\,qa}] = A_3\frac{i}{4}\left[\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k} - 2i\right)e^{-qa} - \left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k} + 2i\right)e^{\,qa}\right]$$

$$A_1 = A_3\frac{i}{4}\left[\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)e^{-qa} - \left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)e^{\,qa} - 2ie^{-qa} - 2ie^{\,qa}\right] = A_3\left[\cosh qa - \frac{i}{2}\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)\sinh qa\right]$$

$$\boldsymbol{T = \frac{v_k A_3^* A_3}{v_k A_1^* A_1} = \frac{A_3^2}{A_1^* A_1} = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{q} - \frac{q}{k}\right)^2 \sinh^2 qa\right]^{-1}} \quad \blacksquare$$

Cuando $E \to 0$ ($\Rightarrow k \to 0$) y si $q_< a >> 1$, entonces,

$$\operatorname{sinh} q_< a = \frac{1}{2}\left(e^{q_< a} - e^{-q_< a}\right) \cong \frac{1}{2} e^{q_< a}.$$

Así que: $T = \left(\frac{4kq_<}{k^2 - q_<^2}\right)^2 e^{-2q_< a}$; y si además $q_</k \sim 1$,

entonces se obtiene: $T = e^{-2q_< a}$

Caso $E > V_0$: Una deducción análoga a la anterior conduce a:

$$T = \frac{v_k A_3^* A_3}{v_k A_1^* A_1} = 1 - R = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{q_>} - \frac{q_>}{k}\right)^2 \operatorname{sin}^2 q_> a}$$

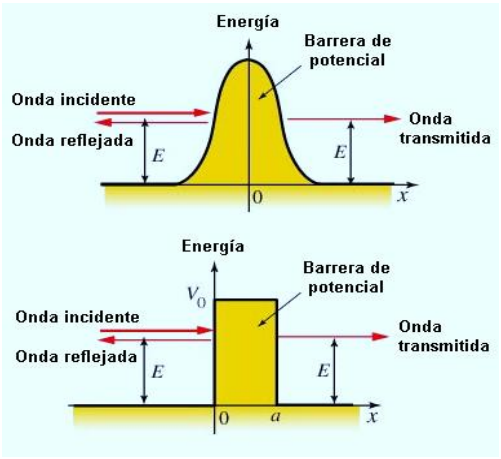


Figura III.2.7: Barrera de potencial.

Pozo Rectangular (potencial finito):

La cuantización de la energía se puede evidenciar en problemas en los que el potencial sea capaz de ligar a una partícula, este es el caso de un potencial de pozo cuadrado; supóngase un potencial de la forma:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < -a/2 \;\; y \;\; x > +a/2 \\ V_0 & \text{si } -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \qquad \text{[III.2.29]}$$

Si la partícula tiene una energía $E < V_0$, según la mecánica clásica solo puede estar dentro del pozo. La partícula está ligada a esta región y va y viene entre los extremos de esta, con impulso de magnitud constante pero dirección alterna. El tratamiento de este problema principia por determinar cualitativamente la forma de las funciones propias que son solución.

Considérese la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y sus soluciones para las tres regiones:

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\psi = 0; \quad k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}E; \quad q^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0).$$

$$\text{I} : \quad \psi = A_1 e^{qx}, \quad x < -\frac{a}{2}$$

$$\text{II} : \quad \psi = A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx}; \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$$

$$\text{III} : \quad \psi = B_3 e^{-qx}, \quad x > \frac{a}{2}$$

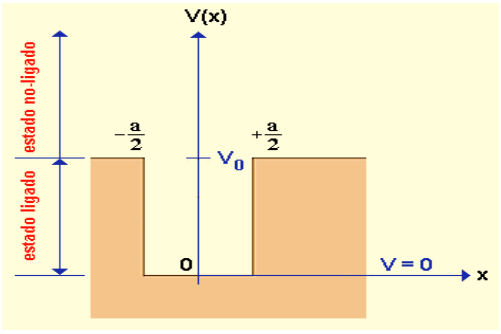


Figura III.2.8: Pozo de potencial.

En la región del pozo de potencial, las ondas viajeras dirigidas en oposición y de igual amplitud se combinarán para formar una onda estacionaria, la cuan se puede obtener haciendo iguales las constantes arbitrarias; es decir, $A_2 = B_2$. Lo cual permite escribir:

$$\psi(x) = B_2\left(e^{ikx} + e^{-ikx}\right) = 2B_2 \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{2} = B' \cos kx; \quad B' \equiv 2B_2$$

$$\psi(x) = A_2\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) = 2iA_2 \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i} = A' \sin kx; \quad A' \equiv 2iA_2 \qquad \text{[III.2.30]}$$

Y como ambas son soluciones de la ecuación de Schrödinger para la región interna del pozo, entonces su suma también lo es como solución general, así se tiene:

$$\psi(x) = A' \sin kx + B' \cos kx \qquad \text{[III.2.31]}$$

En cada una de las tres regiones de x se pueden construir las funciones propias válidas para toda x uniendo las formas supuestas para las soluciones generales de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, estas tres formas contienen al menos cuatro constantes arbitrarias A_1, A', B' y B_3.

Usando las condiciones de continuidad para las funciones propias y sus derivadas es posible encontrar cuatro ecuaciones, que en principio permiten determinar al menos tres de las constantes arbitrarias, de modo que la amplitud de una de ellas puede ser ajustada usando para ello la energía total E. Esto permitirá encontrar una serie de valores posibles para la energía, de modo que estará *cuantizada* a un conjunto de valores propios. Sin embargo, el caso general conduce a una solución que contiene una ecuación trascendental complicada (una ecuación en la cual la incógnita está contenida en el argumento de una función senoidal), lo cual impide expresar la solución general de manera analítica. De cualquier manera, mediante el cálculo numérico computacional, se encuentra que las funciones propias solución para la región interior del pozo penetran la barrera de potencial, aunque se van a cero rápidamente a medida que la energía es menor y en proporción con el potencial.

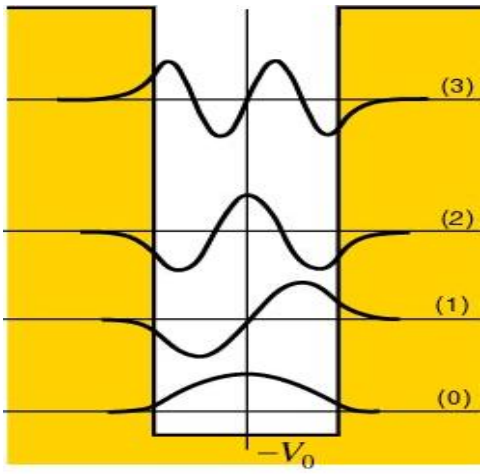


Figura III.2.9: Funciones propias ligadas.

El efecto túnel y sus aplicaciones:

Emisión de partículas α: Una forma de decaimiento radioactiva es la emisión de partículas α (núcleos de helio) por parte de núcleos inestables y pesados, como es el caso del $^{236}_{88}Ra$. Para que una partícula α escape del núcleo debe atravesar una barrera cuya "altura" es varias veces mayor que la energía del sistema partícula α-núcleo. La barrera se debe a una combinación de la fuerza nuclear y la repulsión de Coulomb entre la partícula α y el resto del núcleo. La probabilidad de tunelamiento depende de forma crítica de la altura y ancho de la barrera.

Ocasionalmente una partícula α atraviesa la barrera, lo cual explica el mecanismo básico de este tipo de decaimiento y las grandes variaciones de la vida media de los diferentes núcleos radioactivos.

Las partículas α solo pueden recorrer algunos centímetros en el aire o algunos décimos o centésimos de milímetro en sólidos antes de quedar en reposo debido a las colisiones.

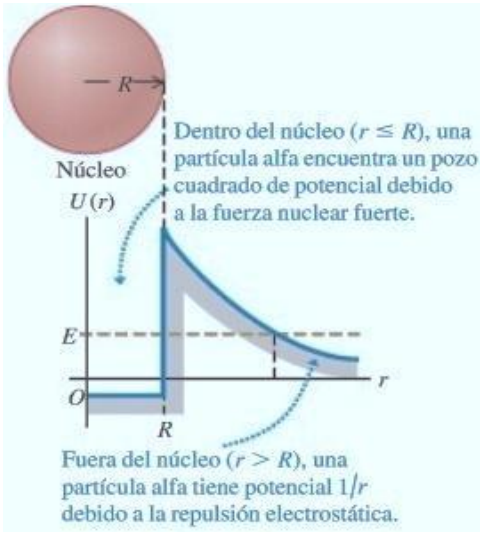


Figura III.2.10: Funciones propias ligadas.

La velocidad de la partícula α emitida, determinada a partir de su trayectoria en un campo magnético transversal, es de $1.52 \times 10^7\ m/s$. Esta rapidez corresponde al 5% de la velocidad de la luz, por lo que se puede usar la ecuación no relativista de energía cinética: $K = mv^2/2$:

$$K = \frac{1}{2}(6.64 \times 10^{-27}\ kg) \times (1.52 \times 10^7\ m/s)^2 = 7.7 \times 10^{-13}\ J = 4.8\ MeV \qquad \textbf{[III.2.32]}$$

El decaimiento radioactivo α es posible siempre que la masa del átomo neutro original sea mayor que la suma de las masas del átomo neutro final y del átomo neutro de helio, lo cual se verifica en la descomposición radiactiva: $^{236}_{88}Ra \rightarrow\ ^{222}_{86}Rn + {}^{4}_{2}He$.

Esto se demuestra considerando la diferencia de masas entre el átomo inicial de radio $(226.054\ u)$ y los productos del decaimientos, que son: el radón $(222.017\ u)$ y el helio $(4.002\ u)$ usando para ello la equivalencia entre la masa y la energía $E = mc^2$ para determinar la energía liberada en el decaimiento.

Así pues, tenemos:

$$226.054\,u - (222.017\,u + 4.002\,u) = +0.005\,u \qquad \textbf{[III.2.33]}$$

cuya equivalencia en energía es:

$$E = (0.005\,u)(931.5\,MeV/u) = 4.871\,MeV \qquad \textbf{[III.2.34]}$$

Así, cabe esperar que los productos del decaimiento salgan con una energía cinética total de $4.871\,MeV$.

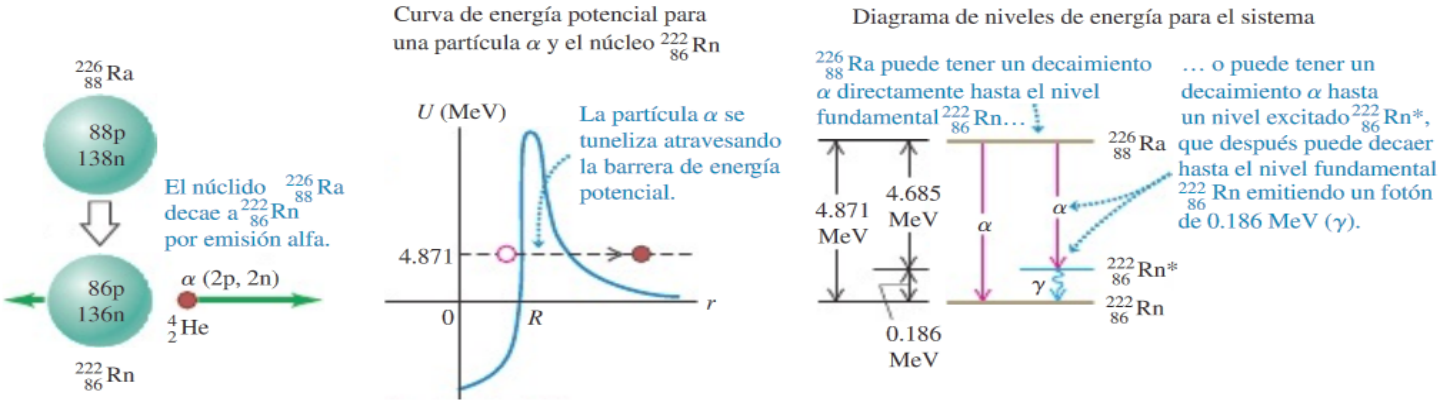


Figura III.2.11: Decaimiento radioactivo con emisión de una partícula α mediante tunelaje.

Molécula de Amoniaco: La generalidad del efecto cuántico de tunneling no está restringido a la física nuclear, también se aplica en otros sistemas. Un ejemplo típico es la penetración de barrera que tiene lugar en la inversión periódica de la molécula de amoniaco, NH_3.

En esta molécula, los pares electrónicos de valencia del nitrógeno se orientan hacia los vértices de un tetraedro, distribución característica cuando existe hibridación sp^3, de modo que existe un par solitario, por lo que la geometría de la molécula es piramidal trigonal.

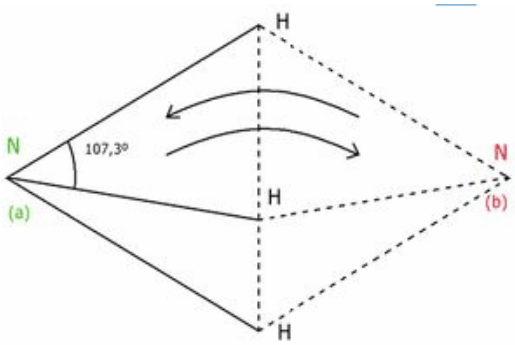


Figura III.2.12: Inversión de la molécula de amoniaco.

Si inicialmente el átomo de nitrógeno se encuentra de un lado, "atravesará un túnel" y aparecerá en el otro, después lo repetirá en la dirección opuesta. El átomo de nitrógeno oscila a través del plano de los átomos de hidrógeno, con una frecuencia de $2{,}38 \times 10^{10}\,Hz$ en el estado base. Esta frecuencia se utilizó como un patrón en los primeros relojes atómicos que miden el tiempo con precisión máxima.

El estado de la molécula es una superposición del estado ψ_1 ("izquierda") y del estado ψ_2 ("derecha"). Así que, $\Psi = C_1(t)\psi_1(x) + C_2(t)\psi_2(x)$.

Aplicando la ecuación de Schrödinger, se tiene el sistema:

$$C_1(t) = 1/2\left[e^{-(i/\hbar)(E-A)t} + e^{-(i/\hbar)(E+A)t}\right]e^{-(i/\hbar)Et}\cos At/\hbar$$

$$C_2(t) = 1/2\left[e^{-(i/\hbar)(E-A)t} - e^{-(i/\hbar)(E+A)t}\right]e^{-(i/\hbar)Et}\sin At/\hbar$$

Entonces, la probabilidad de encontrar a la molécula en el estado ψ_2 es:

$$|C_2(t)|^2 = \sin^2 At/\hbar$$

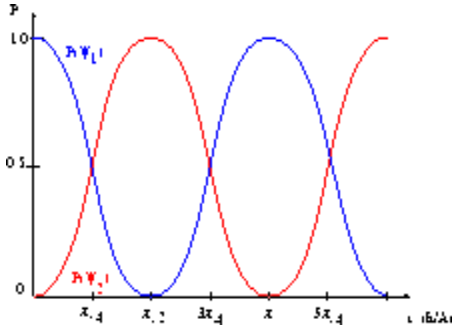


Figura III.2.13: Probabilidad de estados.

Microscopio de tunelaje (STM): Permite adquirir imágenes de superficies a nivel atómico, se considera que una buena resolución es $0.1\ nm$ de resolución lateral y $0.01\ nm$ de resolución de profundidad; que se logra cuando una punta conductora es colocada muy cerca de la superficie a ser examinada, una corriente de polarización (diferencia de voltaje) aplicada entre las dos permite a los electrones pasar al otro lado mediante efecto túnel a través del vacío entre ellas. La resultante *corriente de tunelización* es una función de la posición de la punta, el voltaje aplicado y la densidad local de estados de la muestra. La información es adquirida monitoreando la corriente conforme la punta escanea la superficie, y es desplegada en forma de imagen.

Los electrones se comportan como haces de energía, y en la presencia de un potencial $V(z)$, asumiendo un caso unidimensional, los niveles de energía $\psi_n(z)$ de los electrones están dados por las soluciones a la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_n(z)}{\partial z^2} + V(z)\psi_n(z) = E\psi_n(z)$$

Si a un electrón de energía E se le hace incidir hacia una barrera de potencial $V(z)$, la función de onda del electrón es de la forma:

$$\psi_n(z) = \psi_n(0)e^{\pm ikz};\ k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)$$

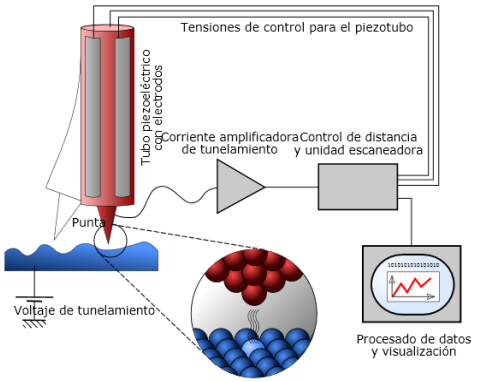


Figura III.2.14: Esquemática de un STM.

Si $E > V(z)$, para una función de onda dentro de la punta o dentro de la muestra.

Dentro de la barrera, $E < V(z)$, así que k^2 toma el valor $q^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)$.

Con la función de onda se calcula la densidad de probabilidad para localizar al electrón.

Si el voltaje es V y la anchura de la barrera es a. La probabilidad, P, de que un electrón en $z = 0$ (borde inferior de la barrera) pueda ser encontrado en $z = a$ (borde superior de la barrera) es:

$$P \propto |\psi_n(0)|^2 e^{-2qa} \qquad \textbf{[III.2.35]}$$

Si el voltaje es pequeño, puede asumirse $V - E \approx M$ en la expresión para q, donde M es la función trabajo, que fija la energía mínima para arrancar un electrón desde un nivel ocupado; el mayor de los cuales está al nivel de Fermi (en metales a $T = 0\ K$), a un nivel vacío.

Si V es positivo, los electrones en la punta hacen túnel hacia los estados vacíos en la muestra; con un voltaje negativo, los electrones hacen túnel desde los estados ocupados en la muestra hacia la punta.

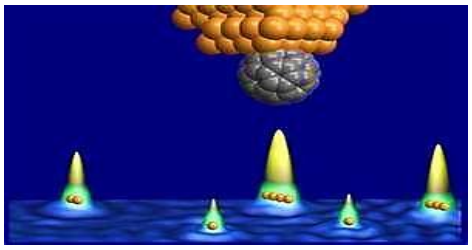


Figura III.2.15: Punta STM, C_{60}.

Matemáticamente, esta corriente de tunelamiento está dada por:

$$I \propto \sum_{E_i}^{E_f} |\psi_n(0)|^2\, e^{-2qa} \qquad \textbf{[III.2.36]}$$

La densidad local de estados disponibles (LDOS) cerca de una energía E dentro de un intervalo ε está dada por:

$$\rho(z, E) = \frac{1}{\varepsilon}\sum_{E-\varepsilon}^{E} |\psi_n(z)|^2 \qquad \textbf{[III.2.37]}$$

Así que, la corriente de túnel a una pequeña tensión de voltaje V es proporcional a la densidad local de estados cerca del nivel de Fermi.

El pozo de potencial infinito unidimensional:

El potencial de pozo infinito tiene la característica de ligar a una partícula con cualquier energía total finita $E \geq 0$. En mecánica clásica cualquiera de estas energías es posibles, pero en la mecánica cuántica solo son permitidos ciertos valores propios discretos E_n. El pozo de potencial cuadrado infinito se escribe:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x < -a/2 \;\; y \;\; x > +a/2 \\ 0 & \text{si } \; -a/2 < x < +a/2 \end{cases}$$

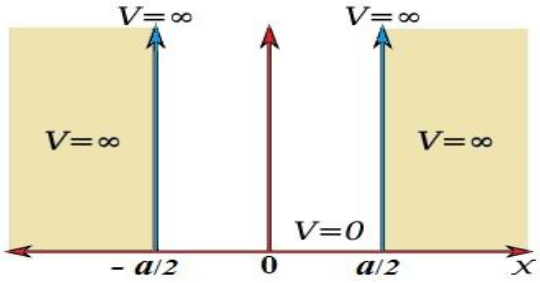


Figura III.2.16: Pozo de potencial cuadrado infinito.

La solución general de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la región interna de un pozo cuadrado infinito se puede escribir como la onda estacionaria:

$$\psi(x) = A\,sin\,kx + B\,cos\,kx\,; \qquad k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}E, \qquad -a/2 < x < +a/2 \qquad \textbf{[III.2.38]}$$

La cual representa una onda estacionaria, con función de onda asociada $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ con nodos fijos, ya que $\psi(x) = 0$ en las regiones exteriores al pozo; de modo que la densidad de probabilidad es cero en estas regiones, ya que la partícula se encuentra estrictamente confinada dentro del pozo por sus paredes de potencial infinitamente altas. En particular, en las fronteras del pozo se tiene $\psi(\pm\, a/2) = 0$; esto es, la onda estacionaria tiene nodos en las paredes de la caja. Así que:

$$A\,sin\left(-\frac{ka}{2}\right) + B\,cos\left(-\frac{ka}{2}\right) = -A\,sin\left(\frac{ka}{2}\right) + B\,cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad y \quad A\,sin\left(\frac{ka}{2}\right) + B\,cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \qquad \textbf{[III.2.39]}$$

Sumando y restando las dos últimas ecuaciones se obtiene:

$$2B\,cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad y \quad 2A\,sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \qquad \textbf{[III.2.40]}$$

Estas ecuaciones no podrán satisfacerse de manera no trivial simultáneamente. Ahora bien, las soluciones para valores no nulos de A y de B son tales que:

$$2B\,cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad \Longrightarrow \quad k_n = \frac{n\pi}{a}; \quad n = 1, 3, 5, \ldots \qquad \textbf{[III.2.41]}$$

$$2A\,sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \quad \Longrightarrow \quad k_n = \frac{n\pi}{a}; \quad n = 2, 4, 6, \ldots$$

La solución para $n = 0$ se excluye porque no describe la existencia de una partícula en el pozo. Utilizando la relación $k = \sqrt{2mE}/\,\hbar$ se encuentra que:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2ma^2}; \qquad n \in \mathbb{N} - \{0\} \qquad \textbf{[III.2.42]}$$

De lo cual se concluye que solo son permitidos ciertos valores de la energía total E, de modo que, la energía total de la partícula en el pozo está cuantizada. Si $E_0 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$, entonces $E = E_0 n^2$.

Para valores del número cuántico n que no sean muy grandes, es posible usar los valores y funciones propios solución de este problema como buenas aproximaciones de un pozo de potencial cuadrado con V_0 grande. Ya que $k = 2\pi/\lambda$, entonces, $\lambda = 2a/n$.

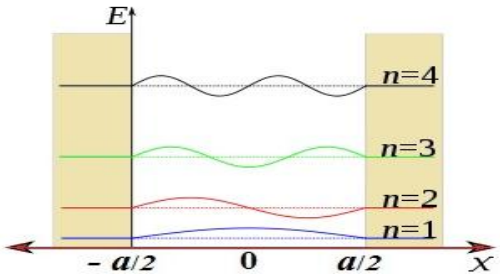


Figura III.2.17: Funciones de onda.

Ejemplo III.2.2 Se encuentran las funciones de onda normalizadas para el caso de una partícula en pozo de potencial infinito unidimensional y el valor esperado de la posición.

Solución: La función de onda de una partícula en un pozo de potencial infinito es: $\psi(x) = A\,sin\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x$.

Ya que las energías posibles son: $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2}$; sustituyendo E por E_n, se obtiene: $\psi_n(x) = A\,sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$.

La probabilidad de hallar a la partícula en el pozo es: $P = \int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2dx = 1$.

Lo que se puede escribir como:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2dx = \int_{-a/2}^{+a/2}|\psi_n(x)|^2dx = A^2\int_0^a sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = A^2\frac{a}{2} = 1.$$

Ya que:

$$\int_0^a sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx = \frac{1}{2}\int_0^a\left[1 - cos\,2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]dx = \left[\frac{a}{2} - \frac{1}{4}\sin 2\left(\frac{n\pi a}{a}\right)\right] = \frac{a}{2}.$$

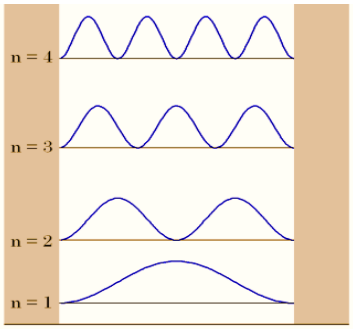


Figura III.2.18: $|\psi_n(x)|^2$.

Entonces, $A = \sqrt{2/a}$. ∴ $\psi_n(x) = \sqrt{2/a}\,sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$. Además, se tiene: $\langle x\rangle = \frac{2}{a}\int_0^a|\psi_n|^2xdx = \frac{a}{2}$ ■

Ejemplo III.2.3 Derivar la ley de cuantización de la energía para el pozo cuadrado infinito usando la relación de De Broglie, $p = h/\lambda$, metiendo un número entero de mitades de longitudes de onda en el ancho a del pozo.

Solución: Es evidente que las funciones propias del pozo cuadrado infinito satisfacen la relación entre las longitudes de onda de De Broglie y la longitud del pozo siguiente: $n\lambda/2 = a$; $n \in \mathbb{N} - \{0\}$.

Esto es, en el pozo entran un número entero de mitades de longitud de onda, lo cual significa: $\lambda = 2a/n$.

Así que según De Broglie, los valores correspondientes al impulso de la partícula son: $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hn}{2a}$.

Como la energía potencial de la partícula es cero dentro del pozo, su energía total es igual a su energía cinética.

Entonces, $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2n^2}{2m4a^2} = \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2}$. ■

Ejemplo III.2.3 Se encuentran las funciones de onda y los niveles de energía de una partícula que se mueve en el plano XY, dentro de una caja de potencial bidimensional de lados L_x y L_y.

Solución: Las funciones de onda deben satisfacer la ecuación de Schrödinger 2D: $-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right]\psi(x,y) = E\psi(x,y)$.

En la que, $\psi(x,y) = \psi_x(x)\psi_y(y) = B\,\sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)$.

Los valores posibles de la energía están cuantizados y vienen dados por:

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\pi\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$$

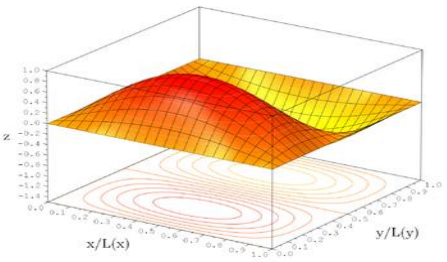


Figura III.2.19: Función de onda.

Las componentes de la función de onda pueden tener valores diferentes o iguales (*degeneración*) para la energía; por ejemplo, $13E_0$ con $n_x = 2$ y $n_y = 3$, o bien, $n_x = 3$ y $n_y = 2$. En la figura se muestra en el plano inferior curvas relacionadas con la probabilidad de localización de la partícula a partir de su probabilidad. ■

El pozo de potencial infinito en tres dimensiones (caja tridimensional ortoédrica):

Considérese una partícula que se mueve en el interior de una caja, de lados L_x, L_y y L_z. Los estados estacionarios de este sistema físico son aquellos que satisfacen la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \qquad \textbf{[III.2.43]}$$

Con las siguientes condiciones:

$$\psi(0,y,z) = \psi(L_x,y,z) = 0$$
$$\psi(x,0,z) = \psi(x,L_y,z) = 0 \qquad \textbf{[III.2.44]}$$
$$\psi(x,y,0) = \psi(x,y,L_z) = 0$$

La función de onda fuera de la caja es cero, lo que expresa el hecho de que la probabilidad de encontrar la partícula fuera de la caja es nula; es decir, la partícula no puede escapar del interior.

Las soluciones de la ecuación anterior pueden encontrarse por el método de separación de variables y son de la forma:

$$\psi(x,y,z) = C\,\text{sin}\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\text{sin}\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)\text{sin}\left(\frac{n_z\pi z}{L_z}\right)$$

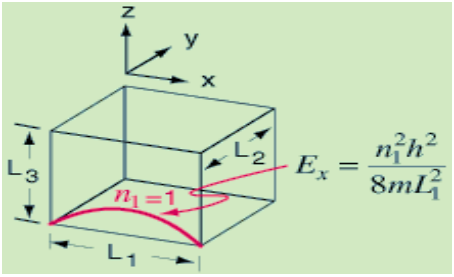


Figura III.2.20: Caja tridimensional.

Donde n_x, n_y y n_z son números enteros, conocidos como *números cuánticos*. Al igual que en el caso unidimensional, n_x, n_y y $n_z \in \mathbb{N} - \{0\}$, es decir, que todos son mayores que cero.

La constante C se obtiene de la condición de normalización:

$$\int_V |\psi_{n_x,n_y,n_z}|^2 = 1 \qquad \textbf{[III.2.45]}$$

y resulta:

$$C = \sqrt{\frac{8}{L_xL_yL_z}} \qquad \textbf{[III.2.46]}$$

De modo que:

$$\psi(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L_xL_yL_z}}\,\text{sin}\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right)\text{sin}\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right)\text{sin}\left(\frac{n_z\pi z}{L_z}\right) \qquad \textbf{[III.2.47]}$$

Los valores posibles de la energía están cuantizados y vienen dados por:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}+\frac{n_z^2}{L_z^2}\right) \qquad \textbf{[III.2.48]}$$

Degeneración: Un caso interesante se produce cuando la caja tiene simetría. Por ejemplo, cuando dos o más lados son iguales, entonces pueden existir varias funciones de onda a las que les corresponda el mismo valor de la energía, lo que se conoce como *niveles de energía degenerados*. Por ejemplo, si $L_x = L_y$, entonces las funciones de onda con $n_x = 1$, $n_y = 2$ y $n_x = 2$, $n_y = 1$ están degeneradas en la energía. En este caso particular, se dice que el nivel de energía está doblemente degenerado.

El oscilador armónico simple:

El oscilador armónico simple se puede utilizar para describir cualquier sistema en el cual una cantidad ejecute *vibraciones pequeñas* alrededor de un punto de *equilibrio estable*, en el que el potencial $V(x)$ deberá tener un mínimo. Puesto que cualquier función potencial realista continua puede aproximarse cerca del mínimo por una parábola, entonces se podrá escribir:

$$V(x) = kx^2/2 \qquad \textbf{[III.2.49]}$$

Una partícula que se mueve bajo la influencia de un potencial de esta forma, experimenta una fuerza restauradora lineal (o ley de Hooke) $F(x) = -dV(x)/dx = -kx$, donde k es la constante de fuerza. De modo que, $d^2x/dt + kx = 0$, cuya solución se puede escribir como: $x = A\,cos(2\pi\nu t + \varphi)$; donde φ es un ángulo de fase que depende del valor de x en el tiempo $t = 0$.

La mecánica clásica, entonces predice que una partícula de masa m, bajo la influencia de la fuerza restauradora lineal ejercida por el potencial y desplazada una cantidad x_0 de la posición de equilibrio, oscilará en un movimiento armónico simple alrededor de la posición de equilibrio con frecuencia:

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \qquad \textbf{[III.2.50]}$$

Si la energía del oscilador es E, la partícula vibra entre $x = -A$ y $x = A$; donde $E = kA^2/2$.

Ahora bien, la ecuación de Schrödinger de un oscilador armónico, con $V = kx^2/2$ es:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{kx^2}{2}\right)\psi = 0 \qquad \textbf{[III.2.51]}$$

Sustituyendo la constante de fuerza k en términos de la frecuencia clásica de oscilación ν, se tiene:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{2\pi m\nu}{\hbar}\right)^2 x^2\right]\psi = 0 \qquad \textbf{[III.2.52]}$$

Introduciendo los parámetros: $\alpha = 2\pi m\nu/\hbar$ y $\beta = 2mE/\hbar^2$, la ecuación toma la forma condensada:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [\beta - \alpha^2 x^2]\psi = 0 \qquad \textbf{[III.2.53]}$$

Resulta conveniente expresar esto en términos de la variable adimensional:

$$u = \sqrt{\alpha}x = \left(\frac{2\pi m\nu}{\hbar}\right)^{1/2} x = \left[\frac{2\pi m}{\hbar}\cdot\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}\right]^{1/2} x = \frac{\sqrt[4]{km}}{\hbar^{1/2}}x \qquad \textbf{[III.2.54]}$$

Así se tiene:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{du}{dx}\frac{d\psi}{du} = \sqrt{\alpha}\frac{d\psi}{du} \qquad \textbf{[III.2.55]}$$

y

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{du}{dx}\frac{d}{du}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \alpha\frac{d^2\psi}{du^2} \qquad \textbf{[III.2.56]}$$

De modo que la ecuación resulta:

$$\alpha\frac{d^2\psi}{du^2}+(\beta-\alpha u^2)\psi=0 \quad\Rightarrow\quad \frac{d^2\psi}{du^2}+\left(\frac{\beta}{\alpha}-u^2\right)\psi=0 \qquad \textbf{[III.2.57]}$$

Se deben encontrar soluciones para las cuales $\psi(u)$ y su primera derivada sean monovaluadas, continuas y finitas para toda $u\in[-\infty,\infty]$. Para la cual la solución es de la forma:

$$\psi_n(u)=A_n e^{-u^2/2}H_n(u) \qquad \textbf{[III.2.58]}$$

Las funciones especiales $H_n(u)=(-1)^n e^{u^2}d^n e^{-u^2}/du^n$, son los conocidos polinomios de Hermite de orden n; en los que los coeficientes asociados a las relaciones de recurrencia se determinan mediante la relación:

$$\beta/\alpha=2n+1 \qquad \textbf{[III.2.59]}$$

Sustituyendo los valores de α y β, se encuentra que:

$$\frac{2mE/\hbar^2}{2\pi m\nu/\hbar}=\frac{E/\hbar}{\pi\nu}=2n+1 \quad\Rightarrow\quad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)h\nu; \quad n=0,1,2,3,\ldots \qquad \textbf{[III.2.60]}$$

Que permite obtener los valores del potencial del oscilador armónico simple expresados en términos de su frecuencia de oscilación clásica.

La mecánica cuántica también proporciona las funciones propias para el oscilador armónico:

$$\psi_0=A_0e^{-u^2/2}$$
$$\psi_1=A_1ue^{-u^2/2}$$
$$\psi_2=A_2(1-2u^2)e^{-u^2/2}$$
$$\psi_3=A_3(3u-2u^3)e^{-u^2/2}$$
$$\psi_4=A_4(3-12u^3+4u^4)e^{-u^2/2}$$
$$\psi_5=A_5(15u-20u^3+4u^5)e^{-u^2/2}$$
$$\ldots$$

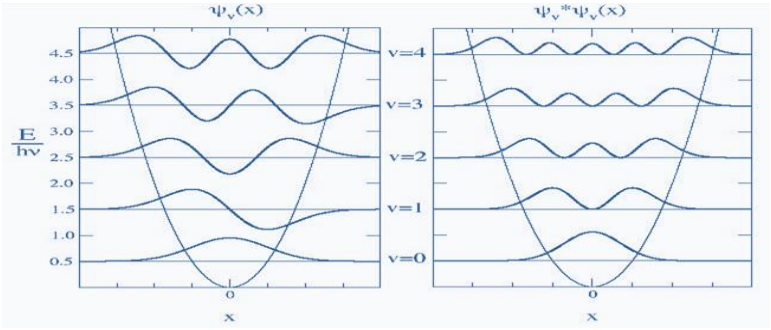


Figura III.2.20: Funciones propias y probabilidad del oscilador armónico.

Para todos los valores de x, las funciones propias están compuestas por el producto de una exponencial y por un polinomio simple de orden x^n. El polinomio es el causante del comportamiento oscilatorio en la región clásicamente permitida $E_n<V(x)$. Fuera de estas regiones, las funciones propias decrecen rápidamente debido a que su comportamiento se ve dominado por la exponencial decreciente. Como el potencial tiene la característica de que $V(-x)=V(x)$ las funciones propias tienen paridad par para n par, e impar para n impar.

Comparación con el caso clásico: Promediando las funciones de las curvas de probabilidad mecánico cuánticas, los resultados para $n>0$ se parecen a las predicciones newtonianas. Esta concordancia mejora al aumentar n. En el análisis newtoniano del oscilador armónico, la energía mínima es cero y la partícula está en reposo en la posición de equilibrio. Esto no es posible en la mecánica cuántica; ninguna solución de la ecuación de Schrödinger tiene $E=0$ y satisface las condiciones de frontera. Además, si hubiera un estado así, violaría el principio de indeterminación, pues no habría incertidumbre en la posición o en el momento. La energía debe ser cuando menos $h\nu/2$.

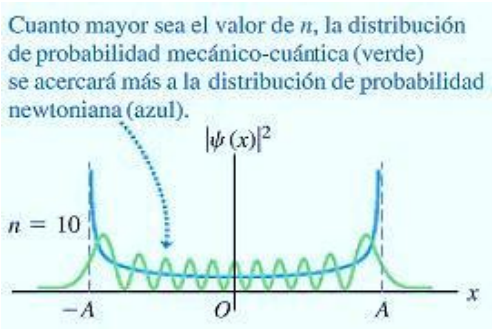


Figura III.2.21: Distribución de probabilidad.

PROBLEMAS: Aplicaciones a casos sencillos:

1. Calcule el nivel de energía para una partícula en una caja, si la partícula es un electrón y la caja mide $5.0 \times 10^{-10}\ m$ en su interior; es decir, un poco más grande que un átomo.

Solución: Considerando la caja como un pozo de potencial infinito unidimensional, los niveles de energía permitidos para una partícula están dados por la siguiente ecuación, en la que el nivel mínimo de energía; esto es, el estado fundamental, corresponde a $n = 1$, así que:

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2mL^2} = \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{6.626\times10^{-34}\ J\cdot s}{8\times(9.19\times10^{-31}\ kg)\times(5.0\times10^{-10}\ m)} = 2.4\times10^{-19}\ J = 1.5\ eV. \quad \blacksquare$$

2. Un electrón de $2.0\ eV$ encuentra una barrera de 5.0 eV de altura. ¿Cuál es la probabilidad de que se filtre a través de la barrera, si el ancho de esta es a) $1.00\ nm$, b) $0.50\ nm$ (más o menos diez y cinco diámetros atómicos, respectivamente).

Solución: La probabilidad T de que la partícula se filtre (transmita) a través de la barrera depende del ancho L de la barrera y de la energía cinética E en comparación con la altura V_0 de a barrera; y es proporcional al cuadrado de la relación de las amplitudes de las funciones senoidales de onda, a los dos lados de la barrera. Cuando $T \ll 1$, se determina en forma aproximada con:

$T = Ge^{-2qL}$ es la *probabilidad de tunelamiento*; donde $G = 16\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)$ y $q_<^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$.

Así que, para: $E = 2.0\ eV$ y $V_0 = 5.0\ eV$, $G = 16\frac{2.0\ eV}{5.0\ eV}\left(1-\frac{2.0\ eV}{5.0\ eV}\right) = 3.8$;

$V_0 - E = 5.0\ eV - 2.0\ eV = 3.0\ eV = 4.805\times10^{-19}\ J$

$$q = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2\times(9.19\times10^{-31}\ kg)\times(4.805\times10^{-19}\ J)}}{1.055\times10^{-34}\ J\cdot s} = 8.9\times10^{9}\ m^{-1},$$

Entonces, a) Cuando $L = 1.00\ nm = 1.00\times10^{-9}\ m$, $2qL = 2\times(8.9\times10^{9}\ m^{-1})\times(1.00\times10^{-9}\ m) = 17.8$,

$$\therefore \quad T = Ge^{-2qL} = 3.8e^{-17.8} = 7.068\times10^{-8}.$$

b) Cuando $L = 0.50\ nm = 0.50\times10^{-9}\ m$, $2qL = 2\times(8.9\times10^{9}\ m^{-1})\times(0.50\times10^{-9}\ m) = 8.9$,

$$\therefore \quad T = Ge^{-2qL} = 3.8e^{-8.9} = 5.2\times10^{-4}.$$

Al reducir a la mitad el ancho de esta barrera la probabilidad aumenta en un factor de casi diez mil. $\blacksquare$

3. Una partícula de masa m está contenida en una caja unidimensional de ancho a. La energía potencial es $V(x)$ es infinito en las paredes de la caja ($x = 0$ y $x = a$) y tiene valor cero en $0 < x < a$. a) Encontrar las soluciones normalizadas y b) para el caso $n = 3$ la probabilidad de que la partícula se localice en: $\frac{a}{3} < x < \frac{2a}{3}$.

Solución: a) En este caso la ecuación de Schrödinger se puede escribir como: $\frac{d^2\psi(x)}{\partial x^2} + k^2\psi(x) = 0$; $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

Que tiene por solución: $\psi(x) = A\,sin\,kx + B\,cos\,kx$; donde, A y B son constantes de integración.

De las condiciones de frontera: $\psi(0) = 0$ y $\psi(a) = 0$ se tiene que $B = 0$; de modo que, $\psi(x) = A\,sin\,kx$.

La segunda, da: $ka = n\pi$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ Se excluye $n = 0$ puesto que corresponde a una solución trivial.

$\therefore \quad \psi(x) = A\,sin\frac{n\pi x}{a}$, que es una solución normalizada.

La constante A se determina con la condición de normalización: $P = \int_0^a |\psi_n|^2 dx = 1$.

Entonces, $A^2 \int_0^a sin^2\frac{n\pi x}{a}dx = \frac{A^2}{2}\left(x - cos\frac{2n\pi x}{a}\right)\Big]_0^a = A^2 a = 1$. Así que, $A = \sqrt{2/a}$.

Por tanto, $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\ sin\frac{n\pi x}{a}$; Usando el hecho de que $k = \frac{n\pi}{a} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$; entonces, $E_n = \frac{n^2h^2}{8ma^2}$.

b) $P\left(\frac{a}{3} < x < \frac{2a}{3}\right) = \int_{a/3}^{2a/3} |\psi_n|^2 dx = \int_{a/3}^{2/3}\left(\frac{2}{a}\right) sin^2\frac{3\pi x}{a}dx = \frac{1}{3}$. $\qquad \langle x\rangle = \frac{2}{a}\int_0^a |\psi_n|^2 x dx = \frac{a}{2}$ ■

4. Un átomo de sodio de masa $3.82 \times 10^{-26}\ kg$ vibra en un cristal, con movimiento armónico simple. La energía potencial aumenta $0.0075\ eV$ cuando el átomo se desplaza $0.014\ nm$ de su posición de equilibrio. a) Determinar la frecuencia angular, según la mecánica newtoniana. b) Calcular las distancias entre los niveles de energía adyacentes, en electrón volts. c) Si un átomo emite un fotón durante una transición de un nivel de vibración al siguiente nivel menor, ¿cuál es la longitud de onda de ese fotón?

Solución: La energía potencial de un oscilador armónico newtoniano es: $V(x) = kx^2/2$

Entonces, $k = \frac{2V}{x^2} = \frac{2\times(0.0075\ eV)}{(0.014\times10^{-9}\ m)^2} = \frac{2\times(1.2\times10^{-21}\ J)}{(0.014\times10^{-9}\ m)^2} = 12.2\ N/m$.

a) La frecuencia angular es: $\omega = \sqrt{k/m} = \sqrt{(12.2\ N/m)/(3.82\times10^{-26}\ kg)} = 1.79\times10^{13}\ rad\cdot s^{-1}$.

b) Los niveles de energía para el oscilador armónico están dados por: $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$, de modo que la distancia entre niveles adyacentes se puede escribir como:

$$E_{n+1} - E_n = \left(n + 1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left[\left(n + 1 + \frac{1}{2}\right) - \left(n + \frac{1}{2}\right)\right]\hbar\omega = \hbar\omega.$$

Así que: $\hbar\omega = (1.054\times10^{-34}\ J\cdot s)\times(1.79\times10^{13}\ s^{-1}) = 1.88\times10^{-21}\ J = 0.0118\ eV$.

c) Partiendo del hecho de que $E = hc/\lambda$; entonces, $\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{(4.136\times10^{-15}\ eV)\times(3\times10^8\ m/s)}{0.0118\ eV} = 1.05\times10^{-4}\ m$. ■

5. Una partícula se encuentra atrapada en un potencial unidimensional $V = kx^2/2$. Al tiempo $t = 0$, el estado de la partícula está descrito por $\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2$, donde ψ es la función propia correspondiente al valor E_n. ¿Cuál es el valor esperado para la energía?

Solución: La forma del potencial corresponde a un oscilador armónico simple, con $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu$.

Entonces, $\langle E\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* E\Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2)^* E(C_1\psi_1 + C_2\psi_2)dx$

$= \int_{-\infty}^{\infty}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2)^*(C_1E_1\psi_1 + C_2E_2\psi_2)dx = C_1^2E_1 + C_2^2E_2 = C_1^2\frac{\hbar\omega}{2} + C_2^2\frac{3\hbar\omega}{2}$;

$\therefore \quad \langle E\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega(C_1^2 + C_2^2)$; donde, $\omega = \sqrt{k/m}$. ■

IV. EL ÁTOMO DE UN ELECTRÓN

IV.1 MODELO ATÓMICO DE BOHR-RUTHERFORD

En el modelo de Rutherford de la estructura del átomo, se supone que toda la carga positiva del átomo, y en consecuencia esencialmente toda su masa, se encuentra concentrada en una región del espacio pequeña localizada en el centro y denominada *núcleo*. Si las dimensiones del núcleo son suficientemente pequeñas, una partícula α (núcleo de helio) que pase muy cerca de él puede ser dispersada a un ángulo grande al atravesar un *solo átomo* gracias a una repulsión debida a su carga que es muy intensa.

La dispersión, a ángulos grandes, se debe la fuerza de Coulomb repulsiva que actúa entre la partícula α cargada positivamente y el núcleo con carga del mismo signo. En los cálculos solo se consideran átomos pesados con objeto de permitir la suposición de que la masa es tan grande comparada con la de la partícula α que aquel no retrocede en forma apreciable durante el proceso de dispersión. También se supuso que la partícula α no penetraba en la región nuclear.

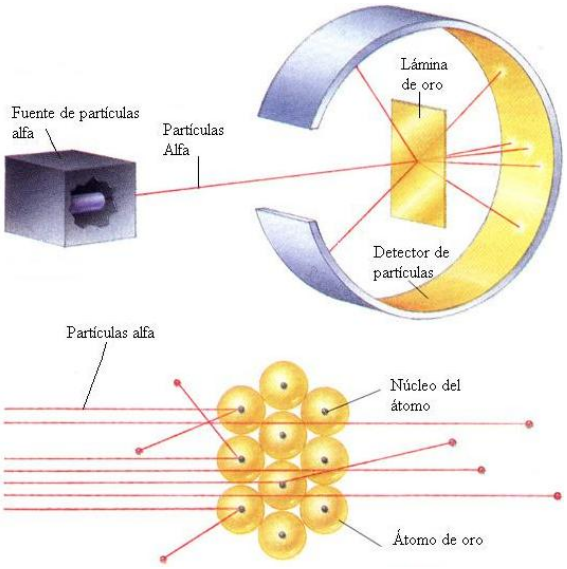


Figura IV.1.1: Experimento de dispersión de Rutherford.

El experimento de Rutherford: Un haz colimado de partículas α se hace incidir en una lámina delgada de oro. Las partículas son dispersadas con ángulos que pueden medirse en una pantalla que sirve como detector de partículas. Cuando una partícula α está lejos de un núcleo de oro, la fuerza de Coulomb que actúa sobre ella es muy pequeña, de manera que la partícula se aproxima al núcleo a lo largo de una línea recta con rapidez constante v (se ha supuesto $v \ll c$). Después de la dispersión, la partícula se moverá, a partir de cierta distancia desde el núcleo, a lo largo de una línea recta y con rapidez constante v'. La posición de la partícula con relación al núcleo queda especificada por la coordenada radial r y el ángulo polar ϕ, medido a partir de un eje paralelo a la trayectoria inicial a una distancia perpendicular b, que se conoce como *parámetro de impacto*. El ángulo de dispersión es θ. La fuerza de Coulomb siempre se encuentra en la dirección radial por lo que el impulso angular L de la partícula permanece constante; de modo que: $Mvb = Mv'b' = L$; y como la energía cinética también se mantiene constante durante la dispersión ya que se ha supuesto que el núcleo permanece en reposo. Entonces $Mv^2/2 = Mv'^2/2$. Por tanto: $v = v'$ y $b = b'$.

De acuerdo con la ley de los senos: $\frac{\Delta p}{\sin\theta} = \frac{mv}{\sin\frac{\pi-\theta}{2}}$,

y puesto que $\sin\frac{\pi-\theta}{2} = \cos\frac{\theta}{2}$ y $\sin\theta = 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$,

$\Rightarrow \Delta p = 2mv\sin\frac{\theta}{2}$.

Como el impulso $\Delta\boldsymbol{p} = \int \boldsymbol{F}\cdot dt$ es en la misma dirección que la variación del momentum, su magnitud es:

$$2mv\sin\frac{\theta}{2} = \int_0^\infty F\cos\phi\, dt.$$

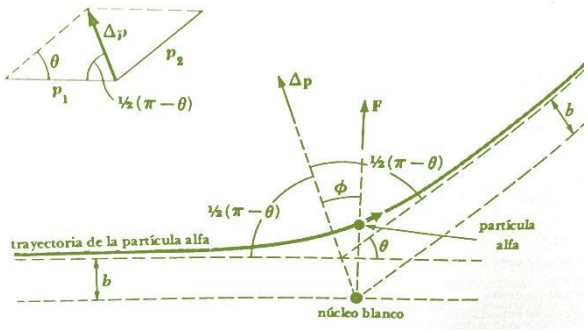


Figura IV.1.1: Trayectoria hiperbólica de una partícula α dispersada en el experimento de Rutherford.

Al hacer el cambio de variable de t a ϕ, se tiene:

$$2mv\sin\frac{\theta}{2}=\int_{-(\pi-\theta)/2}^{+(\pi-\theta)/2}F\cos\phi\,\frac{dt}{d\phi}\,d\phi. \qquad \textbf{[IV.1.1]}$$

El termino $d\phi/dt$ corresponde a la velocidad angular ω de la partícula α alrededor del núcleo. Como la fuerza electrostática que ejerce el núcleo sobre la partícula actúa a lo largo del radio vector que los une, la torca neta es cero y el momento angular $m\omega r^2 = cte$; entonces, $mr^2 d\phi/dt \equiv mvb$. La constante b se conoce como parámetro de impacto.

Así que, $dt/d\phi = r^2/vb$, sustituyendo este resultado en **[IV.1.1]** se obtiene:

$$2mv^2 b\,sin\frac{\theta}{2}=\int_{-(\pi-\theta)/2}^{+(\pi-\theta)/2}Fr^2\,cos\,\phi\,d\phi. \qquad \textbf{[IV.1.2]}$$

Donde $F=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Ze^2}{r^2}$ es la fuerza electrostática que ejerce el núcleo, de número atómico Z, sobre la partícula α.

$$\Rightarrow \qquad \frac{4\pi\varepsilon_0 mv^2 b}{Ze^2}sin\frac{\theta}{2}=\int_{-(\pi-\theta)/2}^{+(\pi-\theta)/2}cos\,\phi\,d\phi=2\,cos\frac{\theta}{2} \qquad \textbf{[IV.1.3]}$$

De modo que el ángulo de dispersión θ está relacionado con el parámetro de impacto b, así que:

$$cot\frac{\theta}{2}=\frac{2\pi\varepsilon_0 mv^2}{Ze^2}b \qquad \textbf{[IV.1.4]}$$

Es evidente que al aumentar b, disminuye θ rápidamente; por lo que se requiere una trayectoria muy próxima para que tenga lugar una desviación apreciable.

La ecuación **[IV.1.4]** no se puede comprobar experimentalmente ya que no hay manera de poder medir el parámetro de impacto que corresponde a un ángulo de dispersión determinado. Es preciso emplear un método indirecto. Para ello, considérese una lámina metálica de espesor t que contenga n átomos por unidad de volumen. Si $\sigma=\pi b^2$ es la *sección transversal de dispersión* para cada núcleo; entonces, el número de partículas dispersadas para ángulos θ o mayores es:

$$f=nt\pi b^2=nt\pi\left(\frac{Ze^2}{2\pi\varepsilon_0 mv^2}\right)^2 cot^2\frac{\theta}{2} \qquad \textbf{[IV.1.5]}$$

Habiendo supuesto que la lámina es lo suficientemente fina como para que las secciones transversales de los núcleos vecinos no se superpongan y que una partícula α deba su dispersión al encuentro con un solo núcleo.

La fracción de partículas α dispersadas se calcula diferenciando **[IV.1.5]** con respecto a θ:

$$df=-nt\pi\left(\frac{Ze^2}{2\pi\varepsilon_0 mv^2}\right)^2 cot\frac{\theta}{2}csc^2\frac{\theta}{2}d\theta \qquad \textbf{[IV.1.6]}$$

El signo menos indica que f disminuye al aumentar θ.

Las partículas dispersadas entre θ y $d\theta$ forman un anillo en una esfera de radio r, el anillo tiene de grosor $rd\theta$ y radio (interior) $r\,\text{sin}\,\theta$, por lo que su área es $dS=(2\pi r\,sin\,\theta)(rd\theta)=4\pi r^2\,sin(\theta/2)\,cos(\theta/2)$.

Si número total de partículas α que llegan a la lámina es N_i, entonces el número de partículas dispersadas en el intervalo $[\theta, d\theta]$ es $N_i\,df$. Así que el número medible $N(\theta)$ de las que inciden en la pantalla por unidad de área tiene un valor: $N(\theta)=N_i\,|df|/dS$, que explícitamente se puede escribir como:

Fórmula de dispersión de Rutherford: $$N(\theta)=N_i nt\left(\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0\,r\,mv^2\,sin^2(\theta/2)}\right)^2. \qquad \textbf{[IV.1.7]}$$

Ejemplo IV.1.1 Se calcula la distancia r_0 más próxima al núcleo que puede alcanzar la partícula con mayor energía de las empleadas en los experimentos de dispersión de Rutherford.

Solución: Una partícula α alcanzará el valor más pequeño r_0 cuando su parámetro de impacto sea $b = 0$, correspondiente a una aproximación central seguida de una dispersión a 180°. En ese momento la energía cinética T de la partícula se transforma totalmente en energía electrostática.

Así que: $T = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Ze^2}{r_0}$, de donde, $r_0 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Ze^2}{T}$.

El mínimo valor de T para una partícula α es 7.7 $MeV = 1.2 \times 10^{-12}\, J$. Ya que $1/4\pi\varepsilon_0 = 9 \times 10^9\, N \cdot m^2/C^2$.

Entonces, $r_0 = \frac{2\times(9\times10^9\, N\cdot m^2/C^2)\times(1.6\times10^{-19}C)^2 Z}{1.2\times10^{-12}\, J} = Z \times (3.8 \times 10^{-16}\, m)$.

Para el oro se tiene $Z = 79$, de modo que: $r_0(Au) = 79 \times (3.8 \times 10^{-16}\, m) = 3.0 \times 10^{-14}\, m$.

El radio del oro, es por tanto, menor que $3.0 \times 10^{-14}\, m$; esto es $1/10{,}000$ del radio del átomo en conjunto. ■

El átomo de hidrógeno (enfoque clásico):

El átomo de hidrógeno cuenta con un solo electrón. Supóngase que la órbita del electrón es circular. Entonces la fuerza centrípeta es:

$$F_c = \frac{m_e v^2}{r} \qquad \textbf{[IV.1.8]}$$

Que mantiene al electrón a una distancia $r$del núcleo y es contrarrestada por la fuerza electrostática:

$$F_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \qquad \textbf{[IV.1.9]}$$

La condición para estabilidad de la órbita es: $F_c = F_e$; así que: $\frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2}$.

De modo que la velocidad v del electrón está relacionada con el radio de la órbita por la ecuación:

$$v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 m_e r}} \qquad \textbf{[IV.1.10]}$$

La energía total Edel electrón en un átomo de hidrógeno es la suma de sus energías cinética y potencial:

$$E = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad \textbf{[IV.1.11]}$$

El signo menos en la energía potencial significa que la fuerza es en sentido $-r$. Sustituyendo el valor de la velocidad v en esta ecuación se obtiene:

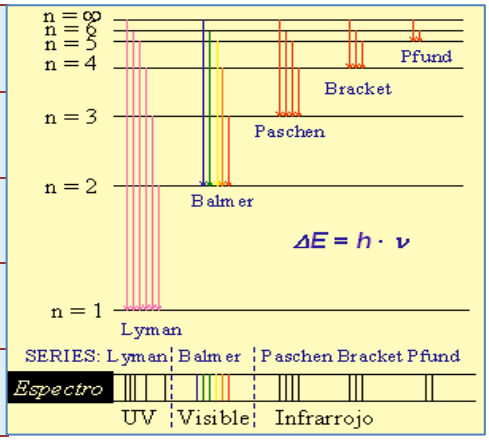
$$E = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \qquad \textbf{[IV.1.12]}$$

Los datos experimentales indican que la energía de enlace del electrón es de $-13.6\, eV = 2.2 \times 10^{-18}\, J$. De modo que con este dato se puede obtener el radio de la órbita:

$$r = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 E} = \frac{(1.6 \times 10^{-19}C)^2 \times (9 \times 10^9\, N \cdot m^2/C^2)}{2 \times (2.2 \times 10^{-18}\, J)} = 5.3 \times 10^{-11}\, m \qquad \textbf{[IV.1.13]}$$

Series espectrales (de emisión y absorción) del átomo de hidrógeno:

Lyman (UV)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right);\ n = 2, 3, 4, \ldots$
Balmer (Visible)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right);\ n = 3, 4, 5, \ldots\ (H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, \ldots)$
Paschen (IR)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right);\ n = 4, 5, 6, \ldots$
Brackett (IR)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right);\ n = 5, 6, 7, \ldots$
Pfund (IR)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}\right);\ n = 6, 7, 8, \ldots$



Donde $R_H = 1.096 \times 10^7 m^{-1}$ es la *constante de Rydberg* para el hidrógeno. Solo la serie de Lyman aparece en el espectro de absorción mientras que todas las series están presentes en el espectro de emisión. Las líneas se van acercando entre sí a medida que se van acercando al límite de cada serie; es decir, cuando $n \to \infty$.

Para átomos alcalinos (Li, Na, K,…) las fórmulas de las series tienen la misma estructura general:

$$\frac{1}{\lambda} = R_X\left[\frac{1}{(m-a)^2} - \frac{1}{(n-b)^2}\right] \qquad \textbf{[IV.1.14]}$$

Donde $R_X = R_H M_X(m_e + M_H)/M_H(m_e + M_X)$ es la constante de Rydberg para el elemento X en cuestión, a y b son constantes para la serie en particular, m es un entero fijo y n un entero variable.

Y para átomos similares al hidrógeno, *hidrogenoides*, con un solo electrón (He^+, Li^{2+}, Be^{3+}, …) se tiene:

$$\frac{1}{\lambda} = R_X Z^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad \textbf{[IV.1.15]}$$

Donde R_X es la constante de Rydberg para el elemento X, Z el número atómico (número de protones en el núcleo atómico) y $n_1 < n_2$ enteros.

En todos los casos se encuentra que para cada línea del espectro de absorción corresponde una línea en el espectro de emisión. Sin embargo, el inverso no es cierto.

Postulados de Bohr:

Primer Postulado: Un electrón en un átomo se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo bajo la influencia atractiva de Coulomb entre el electrón y el núcleo, sujetándose a las leyes de la mecánica clásica.

Segundo Postulado: En lugar de una infinidad de órbitas que podrían ser posibles, en la mecánica clásica, un electrón solo puede moverse en una órbita para la cual su impulso angular orbital L es un múltiplo entero de $\hbar$, la constante de Planck dividida entre 2π. De modo que $L = n\hbar$, $n \in \mathbb{N}$. *Cuantización del momento angular.*

Tercer Postulado: A pesar de que el electrón se acelera constantemente cuando se mueve en estas órbitas permitidas, no radía energía electromagnética. Entonces su energía total E permanece constante.

Cuarto Postulado: Se emite radiación electromagnética si un electrón, que inicialmente se mueve en una órbita de energía total E_i cambia su movimiento de manera discontinua para moverse en una órbita de menor energía total E_f. La frecuencia de la radiación emitida ν es igual a la cantidad $(E_f - E_i)/h$. *Postulado de Einstein.*

Deducción de las expresiones para el radio orbital, el momento angular y velocidad orbital:

Considérese un átomo con un núcleo de carga $+Ze$, masa M y un solo electrón de carga $-e$ y masa m_e. Para un átomo de hidrógeno neutro $Z = 1$, para un átomo de helio simplemente ionizado $Z = 2$, para un átomo de litio doblemente ionizado $Z = 3$, etc. Si el electrón se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo y se supone que la masa del electrón es despreciable comparada con la del núcleo, asumiendo que el núcleo permanece fijo en el espacio. La condición de estabilidad mecánica del electrón es:

$$\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = m_e\frac{v^2}{r} \qquad \textbf{[IV.1.16]}$$

Donde v es la velocidad del electrón en su órbita, y r es el radio de esta. El primer miembro de esta ecuación es la fuerza de Coulomb que actúa sobre el electrón y el segundo miembro es ma donde a es la aceleración centrípeta que mantiene al electrón en su órbita circular. El impulso angular orbital del electrón, $L = m_e vr$, deberá ser constante ya que la fuerza está en dirección radial. Aplicando la condición de cuantización a L:

$$L = m_e vr = n\hbar; \qquad n \in \mathbb{N}. \qquad \textbf{[IV.1.17]}$$

Resolviendo para v se tiene $v = n\hbar/m_e r$ y sustituyendo en **[IV.1.16]**: $\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m_e}{r}\left(\frac{n\hbar}{m_e r}\right)^2$, de modo que:

$$r_n = 4\pi\varepsilon_0\frac{n^2\hbar^2}{m_e Ze^2} = \frac{n^2 a_0}{Z} \qquad \text{y} \qquad v = \frac{n\hbar}{m_e r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{n\hbar}; \qquad n \in \mathbb{N}. \qquad \textbf{[IV.1.18]}$$

Los radios orbitales permitidos son proporcionales al cuadrado del número cuántico n. Al evaluar el radio de la órbita más pequeña ($n = 1$) y su velocidad correspondiente para un átomo de hidrógeno (Z =1) se obtiene: $r_0 = 0.53\ \text{Å} \equiv a_0$ (*radio de Bohr*) y $v_0 = 2.2 \times 10^6\ m/s$. La velocidad es menor que el 1% de la velocidad de la luz, lo que justifica el uso de la mecánica clásica en el modelo de Bohr en vez de la mecánica relativista; para valores grandes de Z la velocidad del electrón se hace relativista y el modelo deja de ser aplicable.

Energía total del electrón:

Para un electrón que se mueve en órbitas permitidas, definiendo el cero de energía potencial cuando el electrón se encuentra a una distancia infinita del núcleo. Entonces la energía potencial V para cualquier distancia finita r se puede obtener integrando el trabajo que haría la fuerza de Coulomb actuando desde r hasta ∞. Así que:

$$V = -\int_r^\infty \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}dr = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}. \qquad \textbf{[IV.1.19]}$$

La energía potencial es negativa debido a que la fuerza de Coulomb es atractiva y se requiere hacer trabajo para mover al electrón desde r hasta el infinito en contra de la fuerza.

Con ayuda de **[IV.1.16]** se puede evaluar la energía cinética del electrón: $K = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{2r}$.

Entonces la energía total del electrón es: $E = K + V = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 2r}$.

Sustituyendo el valor encontrado para r en **[IV.1.18]**, se encuentra que:

$$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad \textbf{[IV.1.20]}$$

La cuantización del impulso orbital del electrón conduce a la cuantización de su energía total. Por encima del estado discreto más alto $E \geq 0$, los electrones se encuentran en un estado no ligado y su energía deja de estar cuantizada pudiendo tener cualquier energía dentro de un continuo como electrones libres.

Concepto y significado de energía de ionización:

En el modelo de Bohr del átomo de hidrógeno, el menor valor permitido (el más negativo) de la energía total electrónica, ocurre para el número cuántico más pequeño, $n = 1$, este es el estado base, el más estable para el electrón y corresponde a una energía de enlace: $E = -13.6\ eV$, también conocida como *energía de ionización*.

A medida que el número cuántico va aumentando la energía se hace menos negativa, aproximándose a cero conforme n se aproxima a infinito. Cuando $n = \infty$, la energía es cero, el electrón deja de estar ligado y el átomo queda ionizado.

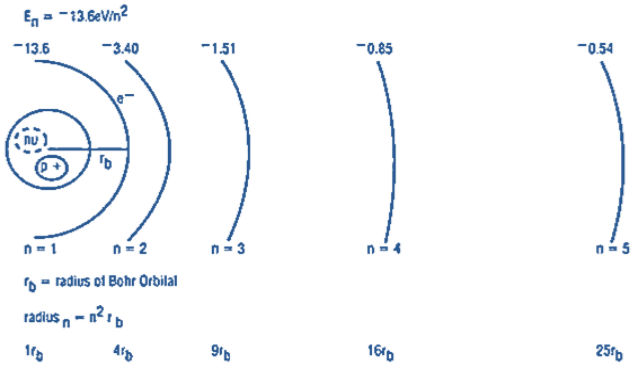


Figura IV.1.2: Energías de *amarre* del átomo de hidrógeno:

$$E_n = -13.6\ eV \cdot Z/n^2.$$

Ejemplo IV.1.2 Se calcula la frecuencia ν de la radiación electromagnética cuando el electrón sufre una transición del estado cuántico n_i al estado cuántico de energía más negativa n_f.

Solución: Del cuarto postulado de Bohr se tiene que: $\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3} Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$.

O bien, $\frac{1}{\lambda} = R_H Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$; donde $R_H \cong R_\infty \equiv \frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_e e^4}{4\pi\hbar^3}$. ■

Átomos hidrogenoides (de un electrón):

El modelo de Bohr trabaja muy bien con átomos monoelectrónicos, con $Z = 2$; es decir, átomos de helio simplemente ionizados He^+. En efecto, el espectro atómico del He^+ es exactamente el mismo que el espectro del hidrógeno con la excepción de que los recíprocos de las longitudes de onda de todas las líneas son casi exactamente cuatro veces mayores; lo cual se explica fácilmente tomando el valor $Z^2 = 4$. En términos del modelo de Bohr también resulta fácil entender las propiedades del espectro de absorción de los átomos monoelectrónicos. Puesto que el electrón en el átomo deberá tener una energía total exactamente igual a uno de los estados de energía permitida. El átomo solo puede absorber cantidades discretas de energía proveniente de la radiación electromagnética incidente, fotones con energía $E = h\nu$ correspondiente a la energía de una transición electrónica permitida.

Corrección por masa nuclear finita: En el análisis anterior se ha supuesto un núcleo infinitamente grande (en comparación con el electrón) a manera de que el núcleo permaneciera fijo en el espacio. Sin embargo, los datos espectroscópicos son tan precisos que conviene tomar en cuenta el hecho de que la masa nuclear en realidad es finita. En tal caso el electrón como el núcleo se moverán alrededor de su centro de masa común, lo cual es equivalente a que el núcleo estuviera fijo y la masa de electrón estuviera reducida ligeramente al valor μ, que es la *masa reducida* del sistema. Así, se tiene que:

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}. \qquad \textbf{[IV.1.21]}$$

Donde M es la masa del núcleo. Sustituyendo μ por m_e en toda la formulación de Bohr se encuentra que todas las ecuaciones son idénticas.

En particular, la fórmula para los recíprocos de las longitudes de onda de las líneas espectrales resulta:

$$\frac{1}{\lambda} = R_M Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right), \quad \text{donde: } R_M \equiv \frac{M}{m_e + M} R_\infty \equiv \frac{\mu}{m_e} R_\infty = \frac{\mu}{m_e} \times (1.097 \times 10^7\ m^{-1}) \qquad \textbf{[IV.1.22]}$$

La cantidad R_M es la constante de Rydberg para el núcleo de masa M; si $M/m_e \to \infty$ entonces $R_M \to R_\infty$.

Ejemplo IV.1.2 Considérese un átomo "positronio" que consiste de un positrón y un electrón que se mueven en torno a su centro de masas, el cual se encuentra equidistante de ambos. (a) ¿Cómo sería su espectro de emisión comparado con el átomo de hidrógeno? (b) cual sería el radio de la órbita para el estado base del positronio?

Solución: (a) En este caso, la masa "nuclear" M es la del positrón que es igual a m_e, la masa del electrón.

Por lo tanto, la masa reducida es: $\mu = \frac{m_e M}{m_e+M} = \mu = \frac{m_e^2}{2m_e} = \frac{m_e}{2}$. Así que, $R_M \equiv \frac{m_e}{m_e+m_e} R_\infty \equiv \frac{R_\infty}{2}$.

Los estados de energía del átomo positronio serán: $E_{positronio} = -\frac{R_M hc}{n^2} = -\frac{R_\infty hc}{2n^2}$.

Y los recíprocos de las longitudes de onda: $\frac{1}{\lambda} = \frac{R_\infty}{2}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$.

(b) Reemplazando m_e por μ en la fórmula correspondiente, se tiene: $r = 4\pi\varepsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{\mu e^2}$. ■

Ejemplo IV.1.3 Un átomo "muónico" contiene un núcleo de carga Ze y un muón negativo μ^-, con carga $-e$ y masa $207\ m_e$, que se mueve alrededor de él. (a) Determinar el radio de la primera órbita de Bohr si $Z = 1$. (b) Encontrar la energía de enlace del estado base. (c) Calcular la primera línea de Lyman para este átomo.

Solución: (a) La masa reducida es: $\mu = \frac{207\ m_e \times 1836\ m_e}{207\ m_e + 1836\ m_e} = 186\ m_e; \Rightarrow\ r = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{186\ m_e e^2} = \frac{0.53\ \text{Å}}{186} = 2.8 \times 10^{-13}\ m.$

(b) $E = -207\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2} = -207 \times 13.6\ eV = -2{,}815\ eV.$

(c) Ya que: $R_M = \frac{\mu}{m_e} R_\infty = 207 R_\infty$; entonces, $\frac{1}{\lambda} = 207 R_\infty \left(1 - \frac{1}{4}\right) = 155.25 R_\infty$

Con $R_\infty = 1.097 \times 10^7\ m^{-1}$, se obtiene: $\lambda \simeq 5.87$ Å ■

Ejemplo IV.1.4 El hidrógeno ordinario contiene aproximadamente una parte en 6000 de *deuterio* o hidrógeno pesado, cuyo núcleo contiene un protón y un neutrón. ¿Cómo afecta al espectro esta masa nuclear doble?

Solución: El espectro sería idéntico si no fuera por la corrección de masa nuclear finita.

Para un átomo de hidrógeno normal: $R_H = \frac{\mu}{m_e} R_\infty = \frac{R_\infty}{\left(1+\frac{m_e}{M}\right)} = \frac{1.097\times10^7\ m^{-1}}{\left(1+\frac{1}{1836}\right)} = 1.096 \times 10^7\ m^{-1}.$

Para un átomo de deuterio o hidrógeno pesado: $R_D = \frac{\mu}{m_e} R_\infty = \frac{R_\infty}{\left(1+\frac{m_e}{M}\right)} = \frac{1.097\times10^7\ m^{-1}}{\left(1+\frac{1}{2\times1836}\right)} = 1.097 \times 10^7\ m^{-1}.$

Las líneas espectrales del deuterio estarán un poco corridas hacia longitudes de onda más cortas. ■

Principio de Correspondencia:

Las predicciones de la teoría cuántica para el comportamiento de cualquier sistema físico deberán corresponder a las predicciones de la física clásica en el límite en el cual los números cuánticos que especifican el estado del sistema se hacen muy grandes.

Limitaciones del modelo:

La teoría "cuántica antigua" aplica bien para átomos monoelectrónicos o parecidos (elementos alcalinos: Li, Na, K, Rb, Cs) pero al aplicarla a átomos más complejos falla bastante, aun en el caso del helio neutro. Otro problema de la teoría es que es un poco falta de coherencia e incapaz de hacer predicciones detalladas como las intensidades de las líneas espectrales, velocidades de transición entre estados energéticos, etc.

PROBLEMAS: Modelo atómico de Bohr-Rutherford

1. ¿Cuál es la distancia de máximo acercamiento a un núcleo de cobre para una partícula α de 5.30 MeV en una colisión frontal?

Solución: Una partícula α alcanzará el valor más pequeño r_0 cuando su parámetro de impacto sea $b = 0$, correspondiente a una aproximación central seguida de una dispersión a 180°. En ese momento la energía cinética T de la partícula se transforma totalmente en energía electrostática.

Así que: $T = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Ze^2}{r_0}$, de donde, $r_0 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Ze^2}{T}$.

$\Rightarrow\ T = 5.30\ MeV = 8.490 \times 10^{-13}\ J.\ Z(Cu) = 29$ y $\ 1/4\pi\varepsilon_0 = 9 \times 10^9\ N \cdot m^2/C^2$.

Entonces, $r_0(Cu) = \frac{2\times\left(9\times10^9\ N\cdot\frac{m^2}{C^2}\right)\times\left(1.6\times10^{-19}C\right)^2\times29}{8.490\times10^{-13}\ J} = 15.739 \times 10^{-15}\ m.$ ■

2. ¿Cuáles son la energía, impulso, y la longitud de onda de un fotón emitido por un átomo de hidrógeno que sufre una transición directa desde un estado excitado con $n = 10$ al estado base? Encontrar la rapidez de retroceso del átomo de hidrógeno en este proceso.

Solución: El fotón emitido corresponde a la serie de Lyman,

de modo que: $\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right) = \left(1.096 \times 10^7 m^{-1}\right)\left(1 - \frac{1}{100}\right) = 1.085 \times 10^7\ m^{-1}$.

Así que $\nu = \frac{c}{\lambda} = (3 \times 10^8\ m/s) \times (1.085 \times 10^7\ m^{-1}) = 3.255 \times 10^{-15}\ s^{-1}$.

Entonces, la energía correspondiente a este fotón es:

$E = h\,\nu = (6.625 \times 10^{-34} J \cdot s) \times (3.255 \times 10^{-15}\ s^{-1}) = 2.156 \times 10^{-18}\ J = 13.456\ eV.$

El impulso, queda dado por: $p = \frac{E}{c} = \frac{2.156\times10^{-18}\ J}{3\times10^8\ m/s} = 7.188 \times 10^{-27} kg \cdot m/s.$

La longitud de onda es: $\lambda = \frac{1}{1.085\times10^7\ m^{-1}} = 921$ Å.

La rapidez de retroceso del núcleo será: $v = \frac{p}{M} = \frac{7.188\times10^{-27} kg\cdot m/s}{1.672\times10^{-27}\ kg} = 4.299\ m/s.$ ■

3. Según el modelo de Bohr, ¿Cuáles son: (a) el número cuántico, (b) el radio de la órbita, (c) el impulso angular, (d) el impulso lineal, (e) la velocidad angular, (f) la rapidez lineal, (g) la fuerza sobre el electrón, (h) la aceleración del electrón, (i) la energía cinética, (j) la energía potencial y (k) la energía total para el estado base del átomo de hidrógeno?

Solución: (a) el número cuántico correspondiente al estado base en el átomo de hidrógeno según el modelo de Bohr es $n = 1$.

(b) El radio de la órbita en el estado base con $n = 1$ del átomo de hidrógeno ($Z = 1$), es: $r_0 = 4\pi\varepsilon_0\frac{\hbar^2}{m_e e^2}$

Así que, $r_0 = \frac{\left(1.054\times10^{-34} J\cdot s\right)^2}{(9\times10^9\ N\cdot m^2/C^2)\times(9.109\times10^{-31}\ kg)\times(-1.602\times10^{-19}\ C\ )^2} = 0.528\ \times 10^{-10}\ m.$

(c) El impulso angular es: $L = m_e v r_0 = n\hbar$, pero $n = 1$, de modo que: $L = 1.054 \times 10^{-34} J \cdot s$.

(d) El impulso lineal es: $p = mv$, y como $L = m_e v r_0 = n\hbar$, con $n = 1$, entonces, $p = \frac{\hbar}{r_0}$.

De modo que $p = \frac{1.054 \times 10^{-34} J \cdot s}{0.528 \times 10^{-10}\, m} = 1.996 \times 10^{-24}\ kg \cdot m/s$.

(e) La velocidad angular es: $\omega = \frac{v}{r} = \frac{p}{m_e r_0} = \frac{1.996 \times 10^{-24}\ kg \cdot m/s}{(9.109 \times 10^{-31}\ kg) \times (0.528 \times 10^{-10}\ m)} = 4.150 \times 10^{16}\ s^{-1}$.

(f) La rapidez lineal del electrón es: $v = \frac{p}{m_e} = \frac{1.996 \times 10^{-24}\ kg \cdot m/s}{9.109 \times 10^{-31}\ kg} = 2.191 \times 10^{6}\ m/s$.

(g) La fuerza sobre el electrón es: $F_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = (9 \times 10^9\ N \cdot m^2/C^2) \times \frac{(-1.602 \times 10^{-19}\ C)^2}{(0.528 \times 10^{-10}\ m)^2} = 8.285 \times 10^{8}\ N$.

(h) La aceleración del electrón: $a = \frac{F_e}{m_e} = \frac{8.285 \times 10^8\ N}{9.109 \times 10^{-31}\ kg} = 9.095 \times 10^{22}\ m/s^2$.

(i) La energía cinética del electrón es: $T = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{(1.996 \times 10^{-24}\ kg \cdot m/s)^2}{2 \times (9.109 \times 10^{-31}\ kg)} = 2.186 \times 10^{-18}\ J = 13.643\ eV$

(j) La energía potencial es: $V = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} = \frac{\left(9 \times 10^9\ N \cdot \frac{m^2}{C^2}\right) \times (-1.602 \times 10^{-19}\ C)^2}{0.528 \times 10^{-10}\ m} = 4.374 \times 10^{-18}\ J = -27.300\ eV$,

Ya que: $1\ J = 6.241\ \times 10^{18}\ eV$.

(k) La energía total para el estado base es: $E = T + V = 13.643\ eV - 27.300\ eV = -13.657\ eV$. ■

5. ¿Cuál es la longitud de onda del fotón con más energía que es capaz de emitir un átomo muónico, con $Z = 1$?

Solución: la longitud de onda de dicho fotón se obtiene de la transición de mayor energía, $\Delta E = E_\infty - E_1$;

así que: $\lambda = c/\nu$; donde, $\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = \frac{E_\infty - E_1}{h}$, pero $E_\infty = 0$ y $E_1 = -2{,}815\ eV$, según el ejemplo **[IV.1.3]**.

De modo que, $\nu = \frac{2{,}815\ eV}{4.135 \times 10^{-15}\ eV \cdot s} = 6.807 \times 10^{17}\ s^{-1}$;

Y entonces: $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \times 10^8\ m/s}{6.807 \times 10^{14}\ s^{-1}} = 4.406 \times 10^{-10}\ m$. ■

6. Usando el modelo de Bohr, calcular la energía para arrancar el electrón al helio simplemente ionizado.

Solución: Para un electrón, en un átomo de hidrógeno, la energía total del estado base es:

$$E = -\frac{m_e Z^2 e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2} = -13.657\ eV.$$

Si en esta fórmula sustituimos $Z^2 = 4$ obtenemos: $E_{He^+} = 4 \times (-13.657\ eV) = -54.628\ eV$.

∴ la energía necesaria para liberar al electrón en el átomo de helio simplemente ionizado es: $E = 54.628\ eV$. ■

IV.2 El Átomo de un Electrón

El átomo con un solo electrón es un sistema ligado tridimensional. El sistema se compone de un núcleo de masa M, cargado positivamente; y un electrón de masa m_e, cargado negativamente que se mueve bajo la influencia de su mutua atracción de Coulomb que, a su vez, los mantiene unidos. Para evitar la dificultad de tratar con dos partículas se utiliza la técnica de masa reducida, representando al átomo real con un modelo en el que el núcleo tiene masa infinita y se mantiene estacionario, y el electrón a la misma distancia que en el átomo real, con una *masa μ_e reducida* dada por:

$$\mu_e = \frac{m_e M}{m_e + M}$$

La energía total del átomo modelo será únicamente la que tenga el electrón de masa reducida y será igual a la energía total del átomo real, considerando un sistema de referencia en el que el centro de masa esté en reposo.

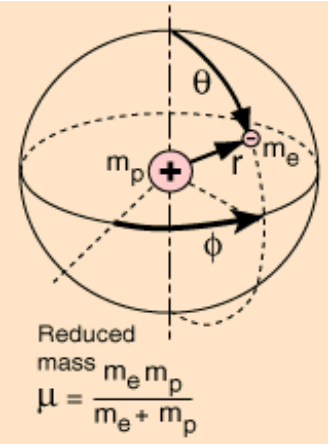


Figura IV.2.1: Masa reducida.

Por tanto, considérese un electrón de masa reducida μ_e que se mueve a una distancia $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ (en coordenadas rectangulares) de un núcleo, con carga nuclear Ze, bajo la influencia del potencial de Coulomb:

$$V(x,y,z) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \qquad \textbf{[IV.2.1]}$$

La expresión clásica para la energía total E de este sistema es:

$$\frac{1}{2\mu_e}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right) + V(x,y,z) = E \qquad \textbf{[IV.2.2]}$$

Sustituyendo las cantidades dinámicas correspondientes al impulso lineal p_x, p_y, p_z, y a la energía E por sus *operadores diferenciales* asociados, entonces se obtiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad \textbf{[IV.2.3]}$$

Operando con cada termino sobre la función de onda $\Psi = \Psi(x,y,z,t)$ se obtiene la ecuación de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_e}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad \textbf{[IV.2.4]}$$

O bien, usando el *operador Laplaciano*:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_e}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \qquad \textbf{[IV.2.5]}$$

Es fácil demostrar que, como el potencial $V(x,y,z)$ no depende del tiempo, existen soluciones de la ecuación de Schrödinger de la forma:

$$\Psi(x,y,z) = \psi(x,y,z)e^{-iEt/\hbar} \qquad \textbf{[IV.2.6]}$$

Donde la función propia $\psi(x,y,z)$ es solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_e}\nabla^2\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \qquad \textbf{[IV.2.7]}$$

Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en coordenadas esféricas:

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial de Coulomb se puede resolver haciendo aplicaciones sucesivas de la técnica de separación de variables para dividir la ecuación diferencial parcial en un conjunto de tres ecuaciones diferenciales ordinarias, cada una de ellas función de una sola coordenada; pero esto no se puede hacer en coordenadas cartesianas, ya que la energía potencial de Coulomb es una función $V(x,y,z)$ de estas tres coordenadas y no puede dividirse.

Esta dificultad se resuelve usando *coordenadas polares esféricas* (r,θ,φ), la r corresponde a la línea que une un punto (electrón) con el origen (núcleo) mientras que θ y φ corresponden a los ángulos polar y azimutal.

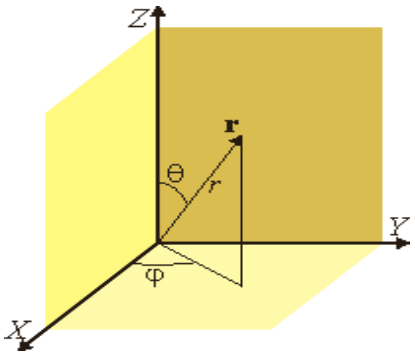


Figura IV.2.2: Coordenadas esféricas.

Así pues la distancia entre el electrón y el núcleo está dada solo por $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$, de modo que el potencial de Coulomb se puede expresar en la forma:

$$V(r)=\frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \qquad \textbf{[IV.2.8]}$$

Las derivadas parciales en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo también cambian de forma, una aplicación directa pero tediosa de las reglas de cálculo demuestran que se puede escribir:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_e}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi)+V(r)\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi) \qquad \textbf{[IV.2.9]}$$

Donde,

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\,sin^2\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\,sin^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad \textbf{[IV.2.10]}$$

El cambio de coordenadas permite encontrar soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de la forma: $\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$, que permite escribir:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu_e}\left[\frac{\Theta\Phi}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{R\Phi}{r^2\,sin^2\,\theta}\frac{d\Theta}{d\theta}\left(sin\,\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{R\Theta}{r^2\,sin^2\,\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}\right]+V(r)R\Theta\Phi=ER\Theta\Phi \qquad \textbf{[IV.2.11]}$$

Si ahora se multiplica toda la ecuación por: $-2\mu_e r^2\,sin^2\,\theta\,/R\Theta\Phi\hbar^2$ y se vuelve a arreglar los términos:

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=-\frac{sin^2\,\theta}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{sin\,\theta}{\Theta}\frac{d\Theta}{d\theta}\left(sin\,\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\frac{2\mu_e}{\hbar^2}r^2\,sin^2\,\theta\,[E-V(r)] \qquad \textbf{[IV.2.12]}$$

El primer miembro de esta ecuación no depende ni de r ni de θ, mientras que el segundo miembro no depende de φ, así su valor común deberá ser una constante, que por conveniencia se designa por $-m_l^2$, de modo que:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=-m_l^2\Phi \qquad \textbf{[IV.2.13]}$$

y

$$-\frac{m_l^2}{2\,sin^2\,\theta}=-\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{1}{\Theta\;sin\,\theta}\frac{d\Theta}{d\theta}\left(sin\,\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\frac{2\mu_e}{\hbar^2}r^2[E-V(r)] \qquad \textbf{[IV.2.14]}$$

Esta última ecuación, también se puede separar, rearreglando términos:

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu_e r^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=\frac{m_l^2}{2\,sin^2\,\theta}-\frac{1}{\Theta\ sin\,\theta}\frac{d\Theta}{d\theta}\left(sin\,\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) \qquad \textbf{[IV.2.15]}$$

Nuevamente, los miembros de la izquierda y derecha dependen de variables distintas, de modo que son iguales a una constante que se denota: $l(l+1)$ y se obtienen las ecuaciones:

$$\frac{m_l^2\Theta}{2\,sin^2\,\theta}-\frac{1}{sin\,\theta}\frac{d\Theta}{d\theta}\left(sin\,\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)=l(l+1)\Theta \qquad \textbf{[IV.2.16]}$$

y

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2\mu_e}{\hbar^2}[E-V(r)]R=l(l+1)\frac{R}{r^2} \qquad \textbf{[IV.2.17]}$$

Al resolver las ecuaciones separadas se encuentra que la ecuación para $\Phi(\varphi)$ tendrá soluciones aceptables solo para ciertos valores de m_l, usando estos valores para la ecuación en términos de $\Theta(\theta)$, resulta que solo tiene valores aceptables para ciertos valores de l; y con estos en la ecuación para $R(r)$, se encuentra que solo hay soluciones aceptables para ciertos valores de la energía total E; es decir, la energía del átomo está cuantizada.

Resolución de la ecuación para el caso del movimiento de una partícula en el campo coulombiano:

Considerando la ecuación **[IV.2.13]** para $\Phi(\varphi)$, es fácil constatar que tiene por solución:

$$\Phi_{m_l}(\varphi)=e^{im_l\varphi} \qquad \textbf{[IV.2.18]}$$

Solución que requiere ser univaluada, de modo que $\Phi(0)=\Phi(2\pi)$, ya que ambos ángulos azimutales, en realidad son el mismo. Evaluando la exponencial en la solución particular, se obtiene:

$$e^{im_l 0}=e^{im_l 2\pi} \qquad \Longrightarrow \qquad 1=cos\,m_l 2\pi+i\,sin\,m_l 2\pi \qquad \textbf{[IV.2.19]}$$

Esta condición se satisface solo si $|m_l|=0,1,2,3,\ldots$

En cuanto a la solución para la ecuación **[IV.2.16]** para $\Theta(\theta)$, el procedimiento para obtenerla es muy parecido al que se utiliza en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con un potencial de oscilador armónico simple. Se encuentra que las soluciones aceptables son aquellas para las que $l=|m_l|,|m_l|+1,|m_l|+2,\ldots$; y se pueden escribir como:

$$\Theta_{lm_l}(\theta)=sin^{|m_l|}\,\theta\,F_{l|m_l|}(cos\,\theta) \qquad \textbf{[IV.2.20]}$$

El procedimiento para obtener las funciones $R(r)$ de la ecuación **[IV.2.17]** también es muy similar al usado en el caso del potencial de oscilador armónico simple. Se encuentra que las soluciones correspondientes a estados ligados solo son aceptables si la energía total E tiene uno de los valores:

$$E_n=-\frac{\mu_e Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \qquad \textbf{[IV.2.21]}$$

Donde el número cuántico n, es uno de los enteros: $n=l+1,l+2,l+3,\ldots.$; la solución es:

$$R_{nl}(r)=e^{-Zr/a_0}\left(\frac{Zr}{a_0}\right)^l G_{nl}\left(\frac{Zr}{a_0}\right); \qquad a_0=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu_e e^2} \qquad \textbf{[IV.2.22]}$$

Los términos $G_{nl}(Zr/a_0)$ son polinomios con formas diferentes según los valores que tomen n y l.

Números cuánticos principal, orbital y magnético: Los resultados anteriores establecen las condiciones para los números cuánticos permisibles, estas son:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \ldots && \textit{Número cuántico principal} \\ l &= 0, 1, 2, 3, \ldots, (n-1) && \textit{Número cuántico orbital} \\ m_l &= 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots, \pm l && \textit{Número cuántico magnético} \end{aligned} \qquad \textbf{[IV.2.23]}$$

La dependencia de las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de Coulomb en coordenadas polares esféricas con los números cuánticos se expresa como:

$$\psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm_l}(\theta)\Phi_{m_l}(\varphi) \qquad \textbf{[IV.2.24]}$$

Degeneración: Las condiciones anteriores hacen que para cada número cuántico n existan generalmente varios posibles valores diferentes para l y m_l. Como la forma de las funciones propias dependen de los tres números cuánticos, evidentemente habrá situaciones en las que dos o más funciones propias diferentes correspondan exactamente al mismo valor propio E_n, así tendrán estados con un comportamiento completamente diferente, pero que, a pesar de todo, tienen la misma energía total. Este fenómeno se conoce como *degeneración* y las funciones propias que corresponden al mismo valor se dice que son *degeneradas*.

Como para cada valor de n hay n valores de l, y para cada valor de l hay $(2l + 1)$ valores posibles de m_l; entonces, se sigue que para cada n hay un total de n^2 funciones propias degeneradas. Si pues:

$$\sum_{i=0}^{n-1} [2(i) + 1] = 2\frac{(n-1)n}{2} + n = n^2 \qquad \textbf{[IV.2.25]}$$

Número cuántico principal: Uno de los resultados más importantes de la teoría de Schrödinger del átomo con un electrón, es la predicción de los valores permitidos de la energía total correspondiente a estados ligados del átomo, dados en función del número cuántico n según la fórmula:

$$E_n = -\frac{\mu_e Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} = \frac{13.6\ eV}{n^2} \qquad \textbf{[IV.2.26]}$$

Número cuántico orbital: Examinando la ecuación para la parte radial $R_{nl}(r)$ de la función de onda ψ:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu_e}{\hbar^2}[E - V(r)]R = l(l+1)\frac{R}{r^2} \qquad \textbf{[IV.2.27]}$$

En principio, esta ecuación está relacionada únicamente con el aspecto radial del movimiento del electrón; es decir, con su movimiento de aproximación o alejamiento del núcleo. Sin embargo, está presente en ella la energía total E del electrón, esta energía incluye la energía cinética del electrón en su movimiento orbital que no tiene nada que ver con su movimiento radial. La energía cinética T del electrón tiene dos partes: T_{radial}, debido a su movimiento de aproximación o alejamiento del núcleo, y $T_{orbital}$, debida a su movimiento alrededor de él. Siendo $V(r)$ al energía potencial o electrostática del electrón, se puede escribir entonces su energía total como:

$$E = T_{radial} + T_{orbital} + V(r) = T_{radial} + T_{orbital} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \qquad \textbf{[IV.2.28]}$$

Sustituyendo esta expresión en la ecuación **[IV.2.27]**, y reordenando, se obtiene:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{2\mu_e}{\hbar^2}\left[T_{radial} + T_{orbital} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu_e r^2}\right]R = 0 \qquad \textbf{[IV.2.29]}$$

Si los dos últimos términos entre corchetes de esta ecuación se anulan entre sí, tenemos: una ecuación diferencial para $R(r)$ constituida exclusivamente por funciones del radio vector. Por tanto, se hace necesario:

$$T_{orbital} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu_e r^2} \qquad \textbf{[IV.2.30]}$$

La energía orbital del electrón es:

$$T_{orbital} = \frac{\mu_e v_{orbital}^2}{2} \qquad \textbf{[IV.2.31]}$$

Puesto que el momento angular ($\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$) del electrón es:

$$L = \mu_e v_{orbital} r \qquad \textbf{[IV.2.32]}$$

Se puede expresar la energía cinética orbital:

$$T_{orbital} = \frac{L^2}{2\mu_e r^2} \qquad \textbf{[IV.2.33]}$$

Por tanto se tiene que:

$$T_{orbital} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu_e r^2} = \frac{L^2}{2\mu_e r^2} \qquad \textbf{[IV.2.34]}$$

De donde se obtiene el momento angular del electrón en términos del número cuántico l:

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)} \qquad \textbf{[IV.2.35]}$$

Así que, como el número cuántico orbital l está limitado a los valores $l = 0, 1, 2, \ldots, (n-1)$, el momento angular L del electrón también está cuantizado.

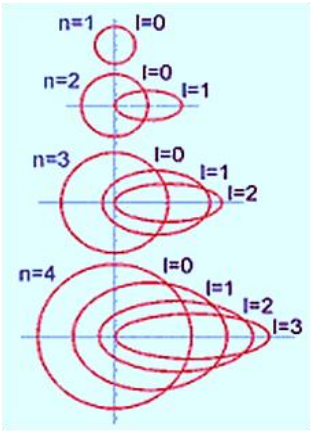


Figura IV.2.3: Número cuántico orbital.

Los diferentes estados del momento angular L del electrón se denotan:

$l = 0$	1	2	3	4	5	6	⋯
s	p	d	f	g	h	i	⋯

Este código se originó en la clasificación empírica de los espectros en las llamadas series espectrales que recibieron los nombres de *definida*, *principal*, *difusa* y *fundamental*. Así, un estado s es el que no tiene momento angular, un estado p tiene el momento angular $\hbar\sqrt{2}$, etc.

La combinación del número cuántico total con la letra que representa al momento angular orbital del electrón proporciona una notación apropiada para los estados atómicos.

En esta notación, un estado en el que $n = 2$ y $l = 0$ es un estado $2s$; por ejemplo, y uno en el que $n = 4$ y $l = 2$ es un estado $4d$. El número máximo de electrones que caben en cada subnivel es el siguiente: $s = 2$; $p = 6$; $d = 10$; $f = 14$.

En la tabla de la figura, se indican las designaciones de los estados atómicos del hidrógeno hasta $n = 7$ y $l = 6$.

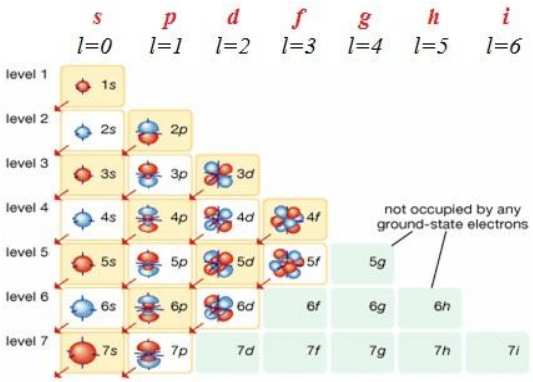


Figura IV.2.4: Estados atómicos del hidrógeno.

Número cuántico magnético: El número cuántico orbital l determina la magnitud del momento angular del electrón. Al igual que el momento lineal, el momento angular es un vector, de modo que para describirlo se requiere que se especifique su *dirección*, su sentido y magnitud.

El vector $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{mv}$ es perpendicular al plano en el que tiene lugar el movimiento de rotación, y su dirección y sentido están dados por la regla de la mano derecha.

Considerando que un electrón que gira alrededor de un núcleo, constituye un diminuto circuito, que como dipolo magnético tiene también un campo magnético asociado; en consecuencia, es capaz de interaccionar con un campo magnético externo $\boldsymbol{B}$.

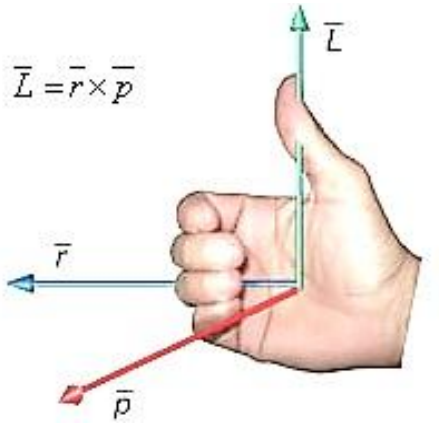


Figura IV.2.5: Regla de la mano derecha.

El número cuántico magnético m_l especifica la dirección de $\boldsymbol{L}$, determinando su componente en dirección del campo. A este fenómeno se le conoce como *cuantización espacial*.

Sí la dirección del campo magnético $\boldsymbol{B}$ es paralela al eje Z, la componente de $\boldsymbol{L}$ en esta dirección es:

$$L_z = m_l \hbar \qquad \textbf{[IV.2.36]}$$

Los posibles valores de m_l para un valor dado de l, van desde $-l$ hasta $+l$ pasando por el cero de modo que las posibles orientaciones del vector de momento angular $\boldsymbol{L}$ en un campo magnético son $2l + 1$.

Nótese que $\boldsymbol{L}$ nunca puede alinearse exactamente paralela o anti-paralelamente con el vector de campo magnético $\boldsymbol{B}$, ya que L_z siempre es más pequeño que la magnitud $|\boldsymbol{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ del momento angular total.

En ausencia de un campo magnético externo, la dirección del eje Z es completamente arbitraria. Por tanto, debe ser cierto que la componente de $\boldsymbol{L}$ en cualquier dirección que se elija es $m_l \hbar$.

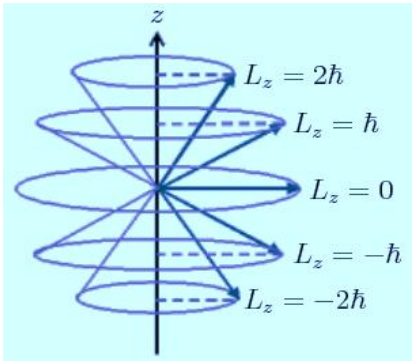


Figura IV.2.6: Cuantización espacial.

Un campo magnético no es la única dirección de referencia posible. Por ejemplo, la línea entre los dos átomos de hidrógeno, en una molécula H_2 tiene el mismo significado experimental.

La razón de este fenómeno, la cuantización espacial, del momento angular se debe al principio de incertidumbre, ya que si $\boldsymbol{L}$ apuntara en una dirección específica, digamos la dirección Z, en vez de describir un cono, el movimiento del electrón estaría confinado al plano XY lo cual solo puede ocurrir si la componente de su momento p_z es infinitamente incierta, lo que es imposible si es parte de un átomo de hidrógeno. En realidad, únicamente la componente L_z de $\boldsymbol{L}$ junto con su magnitud $L = |\boldsymbol{L}| > L_z$ tienen valores definidos, de modo que el electrón no está confinado a un plano único. La dirección del momento angular cambia constantemente y los valores promedio de L_x y L_y son cero, aunque, L_z tenga siempre el valor específico $m_l \hbar$, aunque: $\Delta L_z \Delta\varphi > h$.

Efecto Zeeman en el hidrógeno como demostración de la necesidad de introducción del espín:

En un campo magnético externo $\boldsymbol{B}$, un dipolo magnético tiene una cantidad de energía potencial V_m que depende de la cantidad μ de su momento magnético y de la orientación de este con respecto al campo. La torca τ sobre el dipolo magnético está dada por:

$$\tau \equiv \mu B \, sin\, \theta \qquad \textbf{[IV.2.37]}$$

La torca es máxima cuando el dipolo es perpendicular al campo, y cero cuando es paralelo o antiparalelo a esté.

Para calcular V_m se establece que su valor es cero cuando $\theta = 90°$, o sea cuando μ es perpendicular a $\boldsymbol{B}$. La energía potencial de cualquier otra orientación de μ es igual al trabajo externo que se debe hacer para girar el dipolo desde $\theta = 90° = \pi/2$, hasta el ángulo θ de la nueva orientación.

$$V_m = \int_{\pi/2}^{\theta} \tau \, d\theta = \mu B \int_{\pi/2}^{\theta} sin\,\theta \, d\theta = -\mu B \, cos\,\theta$$

Si μ se está en la dirección de $\boldsymbol{B}$, el valor de $V_m = -\mu B$, es mínimo.

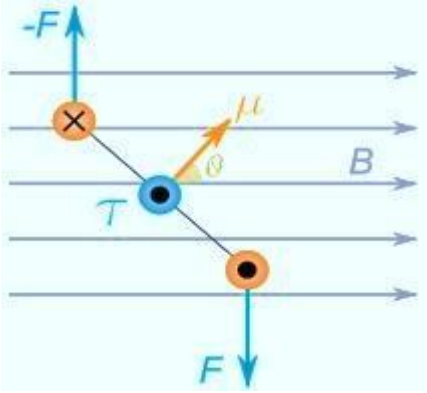


Figura IV.2.7: Dipolo magnético.

El momento magnético de una espira de corriente es: $\mu = iA$, donde i es la corriente y A es el área encerrada. Así que, para un electrón que da ν revoluciones por segundo en la órbita "circular" de radio r de un átomo, esto equivale a una corriente $-e\nu$, entonces su momento magnético es:

$$\mu = -e\nu\pi r^2 \qquad \textbf{[IV.2.38]}$$

Puesto que el momento magnético orbital del electrón en el átomo de hidrógeno depende del momento angular $\boldsymbol{L}$, y siendo su velocidad lineal $v = 2\pi\nu r$, su momento angular es:

$$L = m\nu r = m2\pi\nu r^2 \qquad \textbf{[IV.2.39]}$$

Comparando las fórmulas del momento magnético μ y del momento angular L, se tiene para un electrón orbital:

$$\mu = -\left(\frac{e}{2m}\right)\boldsymbol{L} \qquad \textbf{[IV.2.40]}$$

Que es el *momento magnético del electrón*. El término entre paréntesis se conoce como: *razón giromagnética*; y aunque esta expresión se ha derivado clásicamente, en la mecánica cuántica se encuentra el mismo resultado.

Energía magnética de electrón: La energía potencial magnética de un átomo en un campo magnético es:

$$V_m = \left(\frac{e}{2m}\right) LB \, cos\,\theta \qquad \textbf{[IV.2.41]}$$

Pero el ángulo θ entre $\boldsymbol{L}$ y la dirección Z puede solamente tomar los valores: $cos\,\theta = m_l/\sqrt{l(l+1)}$; y como los valores permitidos para la magnitud del momento angular son: $L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$; se tiene entonces:

$$V_m = m_l\left(\frac{e\hbar}{2m}\right)B = m_l\mu_B B \qquad \textbf{[IV.2.42]}$$

Magnetón de Bohr: En la ecuación **[IV.2.42]** el término entre paréntesis recibe el nombre de *magnetón de Bohr*, su valor constante es: $9.27 \times 10^{-24}\ J/Tesla$.

La energía de un estado atómico depende de los valores de m_l y n. En presencia de un campo magnético, un estado particular n, se desintegra en varios subestados con energías ligeramente mayores o menores que la energía de dicho estado en ausencia del campo, generando un desdoblamiento de las líneas espectrales individuales en líneas separadas al radiar los átomos. El espaciado de las líneas depende de la magnitud del campo. Este fenómeno se conoce como *efecto Zeeman*; y constituye una confirmación de la cuantización espacial.

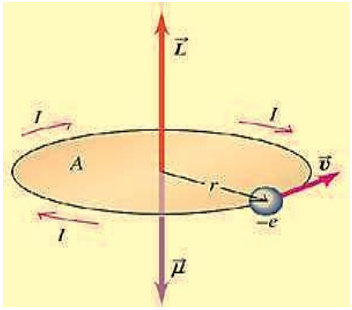


Figura IV.2.8: Dipolo magnético.

Estructura fina: Muchas líneas espectrales en realidad están formadas por dos o más líneas separadas, aunque muy próximas entre sí. Un ejemplo de esta *estructura fina* es la primera línea de la serie de Balmer del hidrógeno, producida por la transición entre los niveles $n = 3$ y $n = 2$ en el átomo de hidrógeno. En este caso, la predicción teórica es de una sola línea de longitud de onda $\lambda = 6{,}563$ Å, mientras que en realidad son dos líneas separadas entre sí por 1.4 Å, error que aparentemente es muy pequeño pero que resulta muy importante.

Regla de selección: Las transiciones más probables son aquellas para las que $\Delta l = \pm 1$. Por ejemplo, $3s \rightarrow 2p$.

Efecto Zeeman normal: Un átomo de hidrógeno de número cuántico magnético m_l tiene la energía magnética:

$$V_m = m_l \left(\frac{e\hbar}{2m}\right) B \qquad \text{[IV.2.43]}$$

Cuando está en presencia de un campo magnético externo de densidad de flujo $\boldsymbol{B}$. Pero m_l puede tener $2l + 1$ valores, de $+l$ a $-l$ pasando por cero, de modo que un estado de número cuántico orbital l se desdobla en $2l + 1$ subestados que difieren en una energía $(e\hbar/2m)B$ cuando el átomo está en un campo magnético.

No obstante, puesto que las variaciones de m_l están limitadas a $\Delta m_l = 0, \pm l$, una línea espectral dada que se produzca en la transición entre dos estados de diferente l se desdobla en solamente tres componentes. Por lo tanto el efecto Zeeman normal consiste en el desdoblamiento de una línea espectral de frecuencia ν_0 en tres componentes cuyas frecuencias son:

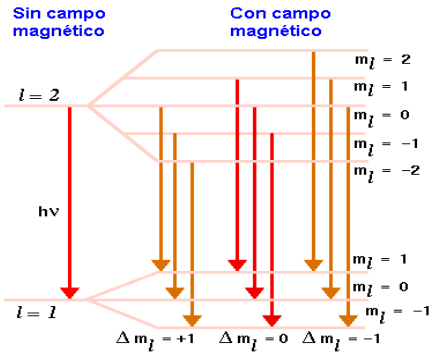


Figura IV.2.9: Efecto Zeeman Normal.

$$\nu_1 = \nu_0 - \frac{e\hbar}{2m}\frac{B}{h} = \nu_0 - \frac{e}{4\pi m}B, \qquad \nu_2 = \nu_0, \qquad \nu_3 = \nu_0 + \frac{e\hbar}{2m}\frac{B}{h} = \nu_0 + \frac{e}{4\pi m}B \qquad \text{[IV.2.44]}$$

Esto ocurre también en átomos con varios electrones en los que los espines se aparean y se cancelan.

En los espectros de algunos elementos bajo ciertas circunstancias, cuatro, seis o aún más componentes pueden aparecer; y aun cuando estén presentes tres componentes, su espaciado puede no estar de acuerdo con las ecuaciones anteriores, lo que se conoce como *efecto Zeeman anómalo*.

Segunda regla de selección: Al analizar transiciones de diferentes estados de m_l, se encuentra que solo pueden ocurrir transiciones en las cuales m_l cambie por 0, $+1$ o -1. No se permiten los cambios en m_l de dos o más.

Significado del espín:

Para explicar la estructura fina de las líneas espectrales y el efecto Zeeman anómalo, Goudmit y Uhlenbeck propusieron en 1925, que el electrón posee un momento angular intrínseco $\boldsymbol{L}_s$, independiente de cualquier momento angular orbital que pueda tener; y asociado con este momento angular, un cierto momento magnético μ_s y, como el electrón está cargado negativamente, tiene dirección opuesta.

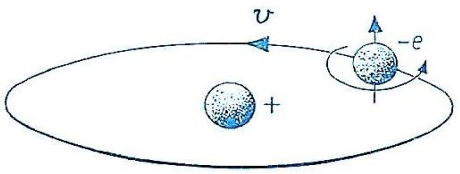


Figura IV.2.10: Significado del espín.

El número cuántico s se usa para describir el momento angular de espín del electrón. El único valor que puede tener es $s = \pm 1/2$. El módulo S del momento angular debido al espín del electrón viene dado por la fórmula:

$$|\boldsymbol{S}| = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar \qquad \text{[IV.2.45]}$$

Cuantización espacial del espín del electrón: Está descrita por el número cuántico magnético de espín m_s. Y como el vector de momento angular orbital puede tener $2l + 1$ orientaciones en un campo magnético, también el momento angular de espín puede tener $2s + 1$ orientaciones, especificadas por $m_s = +1/2$ y $m_s = -1/2$.

La componente S_z del momento angular de espín de un electrón a lo largo de un campo magnético en la dirección Z está determinada por el número cuántico magnético de espín, de modo que:

$$S_z = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar$$

La relación giromagnética del espín electrónico es: $m_s = -\frac{e}{m}S$.

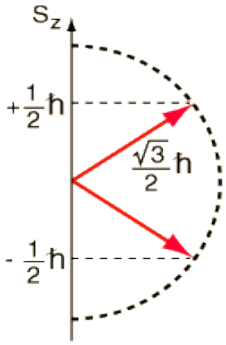


Figura IV.2.11:
Orientaciones del espín.

Habiendo introducido el número cuántico de espín m_s, la descripción completa de un estado atómico requiere de los cuatro números cuánticos: (n, l, m_l, m_s). Por ejemplo, para el hidrógeno es estado base tiene degeneración de orden dos: $(1, 0, 0, 1/2)$ y $(1, 0, 0, -1/2)$. La degeneración de cada nivel es ahora $2n^2$.

Interacción espín-órbita:

La estructura fina de dobletes de la líneas espectrales se puede explicar sobre la base de una interacción magnética entre el momento angular orbital (interacción con el núcleo) y el de espín de los electrones atómicos. Un electrón que gira alrededor de un protón se encuentra en un campo magnético ya que, en su propio sistema de referencia el protón se encuentra girando alrededor de él. Ese campo magnético actúa sobre el momento magnético de espín de los propios electrones para producir una especie de efecto Zeeman interno. La energía V_m de un dipolo magnético de momento μ en un campo magnético de densidad de flujo $\boldsymbol{B}$ es, en general:

$$V_m = -\mu B\cos\theta \qquad \textbf{[IV.2.46]}$$

Donde θ es el ángulo entre μ y $\boldsymbol{B}$. El término $\mu\cos\theta$ es la componente de μ paralela a $\boldsymbol{B}$ que, en el caso del momento magnético de espín del electrón, es μ_{sz}. Así, aceptando que:

$$\mu\cos\theta = \mu_{sz} = \pm\frac{e\hbar}{2m} \qquad \textbf{[IV.2.47]}$$

Se tiene que:

$$V_m = \pm\frac{e\hbar}{2m}B \qquad \textbf{[IV.2.48]}$$

Dependiendo de la orientación de su vector de espín, la energía de un electrón en un estado atómico dado será mayor o menor, según $(e\hbar/2m)B$, que es su energía y en ausencia del acoplamiento espín-órbita. El resultado es el desdoblamiento de cada estado cuántico (excepto los estados s) en dos subestados separados y, en consecuencia, el desdoblamiento de cada línea espectral en dos líneas componentes.

Composición de momentos:

Cada electrón en un átomo tiene un cierto momento angular orbital $\boldsymbol{L}$ y un cierto momento angular de espín $\boldsymbol{S}$, que contribuyen al momento angular total $\boldsymbol{J}$ del átomo.

Momento angular total del átomo: Como todo momento angular, $\boldsymbol{J}$ está cuantizado con una magnitud dada por:

$$J = \hbar\sqrt{j(j+1)} \qquad \textbf{[IV.2.49]}$$

Y una componente en la dirección Z, dada por: $J_z = m_j\hbar$, donde j y m_j son números cuánticos que gobiernan el comportamiento del momento angular total.

Modelo vectorial del átomo:

Como $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$ son vectores, se deben sumar vectorialmente para obtener el momento angular total $\boldsymbol{J}$:

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} \qquad \text{[IV.2.50]}$$

Para obtener las relaciones entre los diversos momentos cuánticos del momento angular, lo más sencillo es partir de las componentes escalares z de los vectores $\boldsymbol{J}$, $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$:

$$J_z = L_z \pm S_z$$
$$m_j\hbar = m_l\hbar \pm m_s\hbar \qquad \text{[IV.2.51]}$$

Los posibles valores de m_l varían desde $-l$ hasta $+l$ pasando por cero, y los de m_s son $\pm s = \pm 1/2$. Como consecuencia m_j debe ser semi entero, al igual que $j = l \pm s$.

Debido a la cuantización simultánea de $\boldsymbol{J}$, $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$, solo pueden existir ciertas orientaciones relativas determinadas. Para un átomo con un solo electrón, hay solo dos orientaciones posibles: la que corresponde a $j = l + s$, de manera que $J > L$; y la otra con $j = l - s$, donde $J < L$.

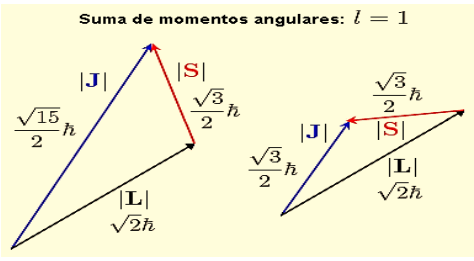


Figura IV.2.12: Suma de momentos.

Los momentos angulares $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$ nunca pueden ser exactamente paralelos e interactúan magnéticamente, como consecuencia se ejercen torcas entre sí. Si no hay ningún campo magnético exterior, el momento angular total $\boldsymbol{J}$ se conserva; y el efecto netos de las torcas internas se manifiesta por la precesión de $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$ alrededor de la dirección de su resultante.

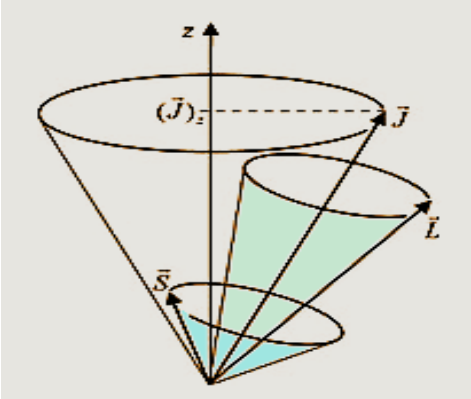


Figura IV.2.13: Momento angular total.

Interacción con un campo magnético: En presencia de un campo magnético externo $\boldsymbol{B}$, entonces $\boldsymbol{J}$ precesiona alrededor de la dirección de $\boldsymbol{B}$, mientras que $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$ continúan precesionando alrededor de $\boldsymbol{J}$, lo cual da origen al efecto Zeeman anómalo ya que orientaciones distintas de $\boldsymbol{J}$ implican energías ligeramente diferentes.

Los núcleos atómicos también tienen momentos angulares intrínsecos y momentos magnéticos, que contribuyen a los momentos angulares totales del átomo y a los momentos magnéticos. Estas contribuciones son pequeñas ya son del orden de $\sim 10^{-3}$ veces la magnitud de los momentos de los electrones, lo que conduce a una *estructura hiperfina* de las líneas espectrales con espaciado típico entre sus componentes de $\sim 10^{-2}$ Å, mientras que una estructura fina típica tiene un espaciado de varios angstroms.

Acoplamiento entre momentos para átomos con varios electrones:

Cuando más de un electrón aporta sus momentos angulares orbital y de espín al momento angular total $\boldsymbol{J}$ de un átomo, este sigue siendo un vector suma de los momentos individuales. El modo normal de acoplamiento para todos los átomos, excepto para los más pesados, es que los momentos angulares orbitales $\boldsymbol{L}_i$ de los diversos electrones están acoplados electrostáticamente en una sola resultante $\boldsymbol{L}$ y los momentos angulares de espín $\boldsymbol{S}_i$, están acoplados independientemente en otra resultante única $\boldsymbol{S}$.

Los momentos $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$ interactúan entonces magnéticamente por el efecto espín órbita para formar un momento angular total $\boldsymbol{J}$. Este esquema se conoce como *acoplamiento* $L - S$.

Acoplamiento $L - S$: $\qquad \boldsymbol{L} = \sum \boldsymbol{L}_i; \quad \boldsymbol{S} = \sum \boldsymbol{S}_i; \quad \boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} \qquad \text{[IV.2.52]}$

Como siempre $\boldsymbol{J}$, $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$ y sus componentes en la dirección Z están cuantizados, donde sus números cuánticos respectivos son J, L, S, $\mathrm{M_J}$, $\mathrm{M_L}$ y $\mathrm{M_S}$, de aquí que:

$$\begin{aligned} L &= \hbar\sqrt{\mathrm{L(L+1)}}\,; & L_z &= \mathrm{M_L}\hbar; & \mathrm{M_L} &= \sum m_{li} \\ S &= \hbar\sqrt{\mathrm{S(S+1)}}\,; & S_z &= \mathrm{M_S}\hbar; & \mathrm{M_S} &= \sum m_{si} \\ J &= \hbar\sqrt{\mathrm{J(J+1)}}\,; & J_z &= \mathrm{M_J}\hbar; & \mathrm{M_J} &= \sum m_{ji} \end{aligned} \qquad \textbf{[IV.2.53]}$$

L y $\mathrm{M_L}$ son siempre enteros o nulos, mientras que los otros números cuánticos son semienteros si el número de electrones que comprenden es impar, y enteros o nulos si el número de electrones es par.

El acoplamiento entre los diferentes $\boldsymbol{L}_i$ comúnmente es tal que la resultante de más baja energía es aquella para la cual L es máximo, lo cual se entiende considerando a dos electrones en la misma órbita de Bohr. Como los electrones se repelen entre sí electrostáticamente, tienden a girar alrededor del núcleo en la misma dirección lo que lleva al máximo a L. El acoplamiento de las $\boldsymbol{S}_i$, en cambio es tal que siempre $\boldsymbol{S}$ es máximo.

La combinación de $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$ que hace que $\boldsymbol{J}$ sea mínimo da lugar a la energía más baja.

Ejemplo IV.2.1 Considérese dos electrones, uno con $l_1 = 1$ y el otro con $l_2 = 2$. Existen tres maneras de que $\boldsymbol{L}_1$ y $\boldsymbol{L}_2$ se puedan combinar en un solo vector $\boldsymbol{L}$, lo que corresponde a los valores $\mathrm{L} = 1$, 2 y 3, ya que son posibles todos los valores de L, desde $l_1 + l_2$ hasta $l_1 - l_2$. El número cuántico de espín s es siempre $+1/2$ y así hay dos posibilidades para la suma $\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_1$, a saber, $\mathrm{S} = 0$ y $\mathrm{S} = 1$. El número cuántico J puede tener todos los valores comprendidos entre $\mathrm{L} + \mathrm{S}$ y $\mathrm{L} - \mathrm{S}$, que en este caso significa que $\mathrm{J} = 0$, 1, 2, 3 o 4.

Acoplamiento j − j: Las fuerzas que acoplan a los vectores $\boldsymbol{L}_i$ en un solo vector $\boldsymbol{L}$ y, a $\boldsymbol{S}_i$ en otro vector $\boldsymbol{S}$, son más fuertes que las fuerzas magnéticas espín-orbita que acoplan a $\boldsymbol{L}$ y a $\boldsymbol{S}$ para formar a $\boldsymbol{J}$ en los átomos ligeros y dominan aun cuando se aplique un campo magnético externo moderado. Sin embargo, en los átomos pesados, la carga nuclear puede ser lo suficientemente grande para producir interacciones espín-órbita comparables en magnitud a las interacciones electrostáticas entre los $\boldsymbol{L}_i$ y los $\boldsymbol{S}_i$, lo que hace que empiece a fallar el esquema de acoplamiento $L - S$. Una falla similar ocurre en campos magnéticos exteriores intensos (típicamente de $\sim 10\ T$).

En el momento de la falla del acoplamiento $L - S$ los momentos angulares totales $\boldsymbol{J}_i$ de los electrones individuales se suman directamente para formar el momento angular $\boldsymbol{J}$ del átomo completo, situación referida como *acoplamiento* $j - j$ ya que cada $\boldsymbol{J}_i$ está definido por un número cuántico j. Entonces:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}_i &= \boldsymbol{L}_i + \boldsymbol{S}_i \\ \boldsymbol{J} &= \sum \boldsymbol{J}_i \end{aligned} \qquad \textbf{[IV.2.54]}$$

Para representar el estado electrónico completo de un átomo, de acuerdo con el número cuántico L del momento angular, se utiliza el siguiente esquema:

$$\begin{array}{cccccccc} \mathrm{L} = 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & \cdots \\ S & P & D & F & G & H & I & \cdots \end{array} \qquad \textbf{[IV.2.55]}$$

Un superíndice delante de la letra (por ejemplo, ${}^2P$) indica la *multiplicidad* del estado; o sea, el número de las diferentes orientaciones posibles de $\boldsymbol{L}$ y $\boldsymbol{S}$ y por tanto, el número de los diferentes valores posibles de J. Esta multiplicidad es igual a $2\mathrm{S} + 1$ en el caso normal en el que $\mathrm{L} > \mathrm{S}$, ya que J varía desde $\mathrm{L} + \mathrm{S}$ hasta $\mathrm{L} - \mathrm{S}$ pasando por 0. Así, cuando $\mathrm{S} = 0$, la multiplicidad es 1 (estado *singulete*) y $\mathrm{J} = \mathrm{L}$; cuando $\mathrm{S} = 1/2$ la multiplicidad es 2 (estado *doblete*) y $\mathrm{J} = \mathrm{L} \pm 1/2$. Cuando $\mathrm{S} = 1$, la multiplicidad es 3 (un estado *triplete*) y $\mathrm{J} = \mathrm{L} + 1$, L o $\mathrm{L} - 1$; etc. Si en cambio, $\mathrm{L} < \mathrm{S}$, la multiplicidad viene dada por $2\mathrm{L} + 1$.

El número cuántico J se usa como subíndice detrás de la letra, de manera que un estado ${}^2P_{3/2}$ (se lee como "doblete P tres medios") se refiere a una configuración electrónica en la que $\mathrm{S} = 1/2$, $\mathrm{L} = 1$ y $\mathrm{J} = 3/2$.

Factor de Landé:

El factor de Landé es una constante de proporcionalidad entre el momento magnético de un sistema y el correspondiente número cuántico. Se utiliza para resumir de forma efectiva los efectos que hacen que se desvíe el momento magnético de los electrones desapareados de un ion paramagnético (es decir, con tendencia a que sus momentos magnéticos libres de espín u orbitales se alinean paralelamente a un campo magnético) del que tendrían esos mismos electrones en el vacío.

El efecto Zeeman consiste en el desdoblamiento de niveles de energía en un átomo cuando se aplica un campo magnético externo. Cuando el campo es lo bastante débil, se puede aplicar teoría de perturbaciones para obtener el valor del desdoblamiento.

El resultado al que se llega es que el aumento (o disminución) en la energía de un nivel concreto depende de los números cuánticos S, L, J y M_J de ese nivel. Si se considera un campo magnético $\boldsymbol{B}$ paralelo a la dirección espacial Z, se obteniene que la variación de energía correspondiente a un estado propio de estructura fina caracterizado por un cambio en la energía:

$$\Delta E = \mu_B B g M_J \qquad \textbf{[IV.2.56]}$$

Donde μ_B es el magnetón de Bohr y g es el factor de Landé. El factor de Landé viene dado por la expresión:

$$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \qquad \textbf{[IV.2.57]}$$

Así también, el impulso angular total J queda relacionado con el momento magnético M_J según la ecuación:

$$M_J = -g\frac{\mu_B}{\hbar}\cdot J \qquad \textbf{[IV.2.58]}$$

Frecuencias de Larmor:

Teorema de Larmor: Para una partícula cargada en una órbita limitada en una región finita del espacio en la que actúa un campo de fuerzas centrales, la adición de un pequeño campo magnético produce un movimiento adicional de precesión superpuesto al movimiento no perturbado de la partícula cargada.

Cuando un momento magnético $\boldsymbol{\mu}$, se coloca en un campo magnético externo $\boldsymbol{B}$, tiende a alinearse con el campo. Clásicamente, el momento magnético se puede visualizar como un circuito de corriente I y la influencia hacia la alineación ejercida por el campo magnético externo puede describirse como una torca τ sobre el circuito de corriente.

Sí el momento magnético surge del movimiento de un electrón en órbita alrededor de un núcleo, el momento magnético μ es proporcional al momento angular del electrón. La torca $\boldsymbol{\tau}$ ejercida produce entonces un cambio perpendicular en el momento angular $\boldsymbol{L}$, causando en el momento magnético un movimiento de precesión alrededor de la dirección del campo magnético externo $\boldsymbol{B}$ en lugar alinearlo. Esto se denomina precesión de Larmor.

Cuando la torca $\boldsymbol{\tau}$ se ejerce de manera perpendicular al momento angular $\boldsymbol{L}$, produce un cambio ΔL perpendicular a L, generando un movimiento de precesión alrededor del eje Z. Si el ángulo de precesión es ϕ, podemos describir el efecto de la torca de la siguiente manera:

$$\tau = \frac{\Delta L}{\Delta t} = \frac{L\sin\theta\,\Delta\phi}{\Delta t} = |\mu B\sin\theta| = \frac{e}{2m_e}LB\sin\theta \qquad \textbf{[IV.2.59]}$$

Que cuando se ponen en forma derivada da una velocidad angular de precesión:

$$\omega_{Larmor} = \frac{d\phi}{dt} = \frac{e}{2m_e}B$$

Este resultado, también se puede visualizar en términos de la energía cuántica de transición entre los dos estados de espín posibles de espín $1/2$. Lo cual puede ser expresado como la energía de un fotón de acuerdo con la relación de Planck. La diferencia de energía potencial magnética es $h\nu = 2\mu B$.

La frecuencia angular asociada al cambio en el espín en una absorción o emisión resonante, a menudo se escribe en la forma general como:

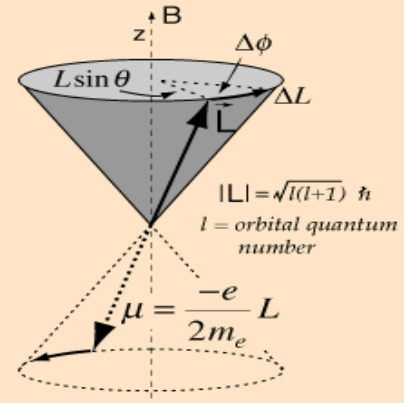


Figura IV.2.14: Precesión de Larmor.

$$\omega = \gamma B \qquad \textbf{[IV.2.60]}$$

Donde γ es la relación giromagnética. Nótese que la frecuencia es dos veces el cambio de energía: $\Delta E = 2\mu B$.

Consecuencias y limitaciones del modelo mecánico cuántico de un electrón:

Uno de los aspectos más importantes de la teorías cuánticas modernas (Schrödinger, Dirac y la electrodinámica cuántica) es la forma de enfrentar el problema del átomo de hidrógeno con tratamientos cada vez más precisos. La teoría de Schrödinger sin el espín del electrón da cuenta de los niveles de energía que se han observado en mediciones espectroscópicas realizadas con una resolución moderada, ya que las mediciones realizadas con una gran resolución revelan el desdoblamiento en estructura fina de los niveles de energía, los cuales se pueden explicar casi completamente añadiendo a la teoría de Schrödinger las correcciones para la interacción espín-órbita y la dependencia relativista de la masa con la velocidad. Mismas que se pueden explicar completamente mediante la teoría de Dirac. Mediciones espectroscópicas con resolución muy alta muestran el corrimiento Lamb, que se puede entender en términos de la electrodinámica cuántica. Mediciones con resolución extremadamente alta muestran los desdoblamientos hiperfinos, de los cuales se puede dar cuenta con la teoría de Schrödinger si se incluye una interacción que considere al espín nuclear. Otro gran éxito de las teorías cuánticas modernas es su habilidad para dar tratamientos muy satisfactorios a las razones de transición y a las reglas de selección observadas en las mediciones de los espectros emitidos tanto por los átomos de hidrógeno como por todos los otros átomos monoelectrónicos y multielectrónicos.

El balance de la teoría cuántica antigua es irregular. El modelo de Bohr predice las energías de los niveles simples del átomo de hidrógeno, las modificaciones relativistas de Sommerfeld concuerdan con los desdoblamientos de estructura fina del hidrógeno, pero esta concordancia es accidental, ya que estas modificaciones relativistas no pueden explicar ni el corrimiento Lamb ni los desdoblamientos hiperfinos. Además, la discrepancia es por varios órdenes de magnitud cuando se le compara con los desdoblamientos de estructura fina en el caso de átomos multielectrónicos. De hecho, el modelo de Bohr falla completamente al explicar muchas de las propiedades más obvias de los niveles de energía de átomos multielectrónicos; por ejemplo, fracasa con el átomo de helio que contiene tan solo dos electrones. La teoría cuántica antigua no es confiable cuando se explican las reglas de selección e incapaz de explicar las razones de transición. Un hecho positivo de la teoría de Schrödinger es que casi todo el trabajo realizado para aplicarla a átomos con un solo electrón es transferible a átomos multielectrónicos y la teoría es lo suficientemente precisa como para explicar los detalles importantes de estos últimos. Además, no es mucho más complicado aplicar la mecánica cuántica de Schrödinger a estos átomos, ya que la mayoría de los electrones en los átomos multielectrónicos se agrupan con otros para formar capas simétricas e inertes en las cuales no es necesario tratarlos individual y solamente aquellos electrones que no se encuentran en tales capas requieren de un tratamiento detallado.

PROBLEMAS: El átomo de un electrón según la mecánica cuántica

1. Estimar la magnitud de la energía potencial de orientación ΔE para el estado $n = 2$, $l = 1$ del átomo de hidrógeno con objeto de comprobar si es del mismo orden de magnitud que el desdoblamiento de estructura fina observado del nivel de energía correspondiente. (No existe energía espín-órbita en el estado $n = 1$, ya que para este estado el único valor posible de l, es $l = 0$ que significa $L = 0$).

Solución: El potencial es: $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$; así que, $\frac{dV(r)}{dr} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$

$$\Delta E = \frac{1}{2m^2c^2r}\frac{dV(r)}{dr}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} = \frac{1}{2m^2c^2r}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2m^2c^2r^3}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$$

La magnitud de $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ es aproximadamente $\hbar^2$ ya que cada uno de estos vectores de impulso angular tiene una magnitud de aproximadamente $\hbar$. El valor esperado de $1/r^3$ para el estado $n = 2$ es $\sim 1/(3a_0)^3$.

Con $a_0 = (4\pi\epsilon_0\hbar^2)/(m_e e^2) = 0.529 \times 10^{-10} m$

Entonces: $|\Delta E| = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2m^2c^2(3a_0)^3}\hbar^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2m^2c^2(3)^3}\frac{m^3e^6}{(4\pi\epsilon_0)^3\hbar^6}\hbar^2 = \cdots \sim 10^{-23} J \sim 10^{-4}\ eV$

Puesto que $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ puede ser tanto positivo como negativo, dependiendo de la orientación relativa de los dos vectores, el nivel de energía se desdobla aproximadamente $2 \times 10^{-4}\ eV$.

Comparando esto con la energía para el nivel $n = 2$, $l = 1$ del hidrógeno, $E_2 = -3.4\ eV$, se ve que la relación del desdoblamiento $|\Delta E/E|$ es alrededor de una parte en 10^4. ■

2. Estimar la magnitud del campo magnético $\boldsymbol{B}$ que actúa sobre el momento magnético dipolar del espín del electrón del problema anterior.

Solución: ya que $\Delta E = -\boldsymbol{\mu}_s \cdot \boldsymbol{B}$, entonces se tiene que: $|\Delta E| \sim \mu_s B$, donde $\mu_s \sim \mu_B \sim 10^{-23}\ A \cdot m^2$.

Por lo tanto, $B \sim \frac{10^{-23}\ Joules}{10^{-23}\ A\cdot m^2} = 1\ tesla.$ ■

3. Enumerar los valores posibles de los números cuánticos j y m_j para estados en los cuales $l = 2$ y por supuesto $s = 1/2$.

Solución: ya que $j = l + 1/2, l - 1/2$, los dos valores posibles de j son $5/2$ y $3/2$;

Como $m_j = -j, -j+1, \ldots, +j-1, j$; los valores posibles de m_j son: $-5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2$; la misma ecuación establece para $j = 3/2$ los valores posibles para m_j, estos son: $-3/2, -1/2, 1/2, 3/2$. ■

4. Calcular la frecuencia de Larmor para un campo magnético de 1 $tesla$.

Solución: para el espín del electrón: $\omega = \frac{2\mu_e B}{\hbar} = \frac{2\cdot 2\cdot\frac{1}{2}(5.792\times10^{-5}\ eV/T\ )(1T)}{6.58\times10^{-16}\ eV} = 1.76082 \times 10^{11}\ s^{-1}$

De modo que la frecuencia de Larmor para el electrón es: $\nu = \frac{\omega}{2\pi} = 28.025\ GHz.$ ■

V. ÁTOMOS MULTI-ELECTRÓNICOS

V.1 PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULI

El principio de exclusión establece que no pueden existir en el átomo dos electrones en el mismo estado cuántico, cada electrón en el átomo debe tener una serie diferente de números cuánticos n, l, m_l, m_s. Es posible determinar el estado de un átomo por medio de su espectro y deducir los números cuánticos asociados. En el espectro de cada elemento, excepto en el hidrógeno, *falta* una serie de líneas que corresponden a las transiciones que suponen dos o más electrones con números cuánticos idénticos.

Ejemplo V.1.1: En el helio no se observan las transiciones a, o desde el estado de configuración fundamental en que los espines de los electrones tienen la misma dirección para dar un espín total de 1, aunque se observan las transiciones hacia y de las otras configuraciones de estado fundamental, en las que los espines están en direcciones opuestas, para dar un espín total de 0. El estado en que no se presentan, los números cuánticos de ambos electrones son: $n = 1$, $l = 0$, $m_l = 0$ y $m_s = 1/2$, mientras que, en el estado conocido, uno de los electrones tiene $m_s = 1/2$ y el otro $m_s = -1/2$. ■

Indistinguibilidad de partículas idénticas: La función de onda completa $\psi(1, 2, 3, \dots, n)$ de un sistema de n partículas se puede expresar como el producto de las funciones de onda de las partículas individuales:

$$\psi(1, 2, 3, \dots, n) = \psi(1)\psi(2)\psi(3) \cdots \psi(n) \qquad \textbf{[V.1.1]}$$

Supóngase entonces, un sistema de dos partículas, una de ellas en el estado cuántico a y la otra en el b. Puesto que las partículas son idénticas, no habrá diferencia en la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ del sistema si se intercambian las partículas:

$$|\psi|^2(1,2) = |\psi|^2(2,1) \qquad \textbf{[V.1.2]}$$

Por lo tanto, la función de onda $\psi(2,1)$, que representa las partículas combinadas se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \psi(2,1) &= \psi(1,2) && Simétrica \\ \psi(2,1) &= -\psi(1,2) && Antisimétrica \end{aligned} \qquad \textbf{[V.1.3]}$$

Y cumplir todavía la ecuación **[V.1.2]**. La función de onda del sistema no es mesurable, y por eso se puede alterar el signo por el cambio de las partículas. Las funciones de onda no alteradas por un cambio de partículas se dice que son *simétricas*, mientras que las que invierten el signo por el cambio son *antisimétricas*.

Si la partícula 1 está en el estado a y la 2 en al b, la función de onda es: $\psi_I = \psi_a(1)\psi_b(2)$, mientras que si la partícula 2 está en el estado a y la 2 en el b, será: $\psi_{II} = \psi_a(2)\psi_b(1)$. Ya que las dos partículas no se pueden distinguir no hay manera de saber cuál función de onda describe el sistema. La probabilidad de ambas es la misma. El sistema invierte la mitad del tiempo en cada una de las dos configuraciones posibles. Una combinación lineal de ambas es la descripción apropiada para el sistema, pero hay dos combinaciones lineales posibles, la simétrica y la antisimétrica:

$$\begin{aligned} \psi_S &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)] && Simétrica \\ \psi_A &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)] && Antisimétrica \end{aligned} \qquad \textbf{[V.1.4]}$$

Donde $1/\sqrt{2}$ es el factor de normalización.

Aunque ambas funciones de onda cumplen con la ecuación **[V.1.2]**, tienen una diferencia importante: en el caso de la función simétrica las dos partículas pueden existir simultáneamente en el mismo estado, con $a = b$, mientras que, en el caso de la función antisimétrica, si $a = b$ se tiene que $\psi_A = 0$. Las dos partículas no pueden estar en el mismo estado cuántico. Comparando esto con el principio empírico de Pauli, se concluye que los sistemas de electrones están descritos por funciones de onda antisimétricas.

Fermiones: Se demuestra experimentalmente que, todas las partículas que tienen espín semientero $(1/2,\ 3/2,$ etc.) poseen funciones de onda antisimétricas para un cambio de cualquier par de ellas; esas partículas, incluyendo los protones, los neutrones y los electrones, cumplen el principio de exclusión de Pauli cuando están en el mismo sistema; esto es, cuando se mueven en un campo de fuerzas común, cada miembro debe estar en un estado cuántico diferente. A estas partículas se les denomina *partículas de Fermi* o *fermiones* ya que el comportamiento de sus agregados está regido por las leyes de distribución estadística de Fermi-Dirac.

Bosones: Las partículas cuyo espín es cero, o bien un número entero, como es el caso de los fotones, las partículas α y los átomos de helio, tienen funciones de onda simétricas para el intercambio de dos de ellas; y no obedecen al principio de exclusión. Se conocen como *partículas de Bose* o *bosones*, porque la ley de distribución que describe sus agregados es la estadística de Bose-Einstein.

Mecánica Estadística:

La mecánica estadística intenta relacionar, en un conjunto de partículas, las propiedades macroscópicas con las propiedades microscópicas. No trata del movimiento o interacción de las partículas individuales, sino que intenta aclarar su comportamiento más probable. En la mecánica estadística se considera que las partículas interactúan entre sí débilmente o con las paredes de su recipiente lo suficiente como para establecer un equilibrio térmico en conjunto. Básicamente se consideran tres tipos de partículas:

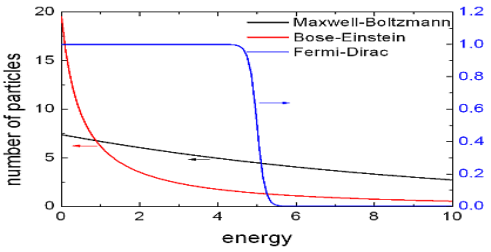


Figura V.1.1: Funciones estadísticas.

1. Partículas iguales de cualquier espín, lo suficientemente separadas como para poderse distinguir. Las moléculas de un gas son partículas de este tipo y se les aplica la:

Ley de distribución de Maxwell-Boltzmann: $$n_i = \frac{g_i}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T}} \qquad \textbf{[V.1.5]}$$

2. Partículas idénticas de espín cero o entero que no se puedan distinguir unas de otras. Estas partículas no obedecen al principio de exclusión de Pauli. Los fotones son partículas de Bose o bosones. se les aplica la:

Ley de distribución de Bose-Einstein: $$n_i = \frac{g_i}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} - 1} \qquad \textbf{[V.1.6]}$$

3. Partículas idénticas de espín $1/2$ que no se pueden distinguir unas de otras. Estas partículas obedecen al principio de exclusión. Los electrones y nucleones son partículas de Fermi o fermiones y se adhieren a la:

Ley de distribución de Fermi-Dirac: $$n_i = \frac{g_i}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} + 1} \qquad \textbf{[V.1.7]}$$

En las tres fórmulas anteriores, n_i es el número de partículas con energía ε_i, μ es el potencial químico, k_B es la constante de Boltzmann y g_i es el número de estados con la misma energía ε_i.

Espacio fase: El estado de un sistema queda definido clásicamente, en un instante dado si se conoce la posición y el momentum de cada partícula; es decir, (x, y, z, p_x, p_y, p_z). El espacio combinado de las seis coordenadas se conoce como *espacio fase*. De modo que la partícula en el espacio fase queda definida por un punto y el estado de un sistema de partículas corresponde a una distribución determinada de puntos en dicho espacio.

El principio de incertidumbre obliga a dividir el espacio en celdillas de tamaño: $\tau = dxdydzdp_x dp_y dp_z$, donde, se requiere que: $dxdp_x \geq \hbar$, $dydp_y \geq \hbar$ y $dzdp_z \geq \hbar$. Por tanto, por tanto, $\tau \geq \hbar^3$. Así que, en el espacio fase un punto es en realidad es una celda cuyo volumen es del orden de $\hbar^3$.

Considerando N moléculas con energías limitadas a los valores $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \ldots, \varepsilon_i, \ldots$ que pueden representar estados discretos, o bien, energías medias dentro de una secuencia de intervalos; y si se supone que más de una celda en el espacio fase puede corresponder a una energía dada, lo que interesa es conocer la distribución más probable de moléculas. Una distribución es más probable que otra si existe un mayor número, digamos W, de maneras en que las moléculas puedan pertenecer a la distribución. De modo que la distribución más probable de partículas será aquella en la que W sea máxima.

Para obtener el valor de W se supone que existen g_i celdas con la energía ε_i, de modo que el número de formas en que una molécula puede tener esa energía es precisamente g_i. El número total de maneras en las que dos moléculas pueden tener la energía ε_i es g_i^2. De este modo, el número de maneras en las que n_i moléculas pueden tener la energía ε_i es entonces, $(g_i)^{n_i}$. Así el número de maneras en que N moléculas pueden estar distribuidas es:

$$(g_1)^{n_1}(g_2)^{n_2}(g_3)^{n_3}\cdots \qquad \textbf{[V.1.8]}$$

Cumpliendo las condiciones:

$$\sum n_i = n_1 + n_2 + n_3 + \cdots = N; \quad \sum n_i\varepsilon_i = n_1\varepsilon_1 + n_2\varepsilon_2 + n_3\varepsilon_3 + \cdots = E \qquad \textbf{[V.1.9]}$$

Ya que se supone que las partículas interactúan débilmente, de modo que la energía total del sistema puede considerarse prácticamente igual a la suma de las energías individuales de las partículas que lo constituyen. Sin embargo, se debe considerar las permutaciones posibles entre los posibles niveles de energía. Las N moléculas se pueden distribuir de $N!$ formas diferentes. Pero cuando hay más de una molécula con una cierta energía, las permutaciones $n_i!$ entre ellas no tienen ningún significado, de modo que simplemente no cuentan. Así que, el número total de permutaciones posibles $N!$ divido entre las permutaciones que no cuentan es:

$$\frac{N!}{n_1!\,n_2!\,n_3!\ldots} \qquad \textbf{[V.1.10]}$$

Así, el número total de formas en que se pueden distribuir N moléculas entre los niveles de energía posibles, es:

$$W = \frac{N!}{n_1!\,n_2!\,n_3!\ldots}(g_1)^{n_1}(g_2)^{n_2}(g_3)^{n_3}\cdots \qquad \textbf{[V.1.11]}$$

Ahora, el problema ser reduce a encontrar la distribución de probabilidad de que una partícula se encuentre en estado g_i con energía ε_i; para lo cual, considerando los diferentes tipos de partículas y después de realizar un tratamiento matemático no muy complejo pero sí un tanto engorroso se llega a la siguiente tabla de resultados:

ESTADÍSTICAS:	**Maxwell-Boltzmann**	**Bose-Einstein**	**Fermi-Dirac**
Partículas idénticas	distinguibles	indistinguibles	indistinguibles
Principio de Ex. de Pauli	no	no	si
Espín	cualquiera	0, o entero	$1/2$ o semientero
Funciones de onda	no deben traslaparse	simétricas	antisimétricas
Función de distribución	$f_{MB}(\varepsilon) = A^{-1}e^{-\varepsilon/k_BT}$	$f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i-\mu)/k_BT}-1}$	$f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i-\mu)/k_BT}+1}$

Distribución electrónica en los átomos:

Dos reglas básicas determinan la estructura de los átomos complejos:

1. Un sistema de partículas es estable cuando su energía total es un mínima.
2. Únicamente puede existir un solo electrón en cualquier estado cuántico particular de un átomo.

Aunque los diversos electrones en un átomo complejo interactúan entre sí, se puede comprender gran parte de la estructura atómica simplemente considerando a cada electrón como si existiera en un campo medio de fuerzas constantes, el campo eléctrico de la carga nuclear Ze, disminuido por el blindaje parcial de aquellos electrones que están más próximos al núcleo. Todos los electrones que tienen el mismo número cuántico n están, aproximadamente a la misma distancia del núcleo y tienen energías similares. Normalmente se dice que estos electrones ocupan la misma *capa* atómica, las cuales se denotan con letras mayúsculas:

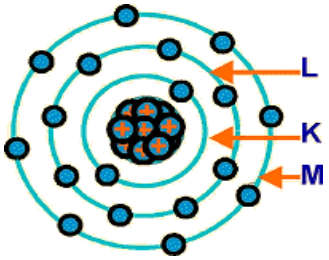


Figura V.1.2: Capas atómicas.

$$\begin{array}{cccccccc} n = 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & \cdots \\ K & L & M & N & O & P & Q & \cdots \end{array} \qquad \text{[V.1.12]}$$

La energía de un electrón en una capa determinada depende también, hasta un cierto límite, de su número cuántico orbital. Un electrón con número l pequeño es más probable que se encuentre cerca del núcleo, lo que supone una energía total más baja (una energía de enlace más alta). Los electrones que comparten un cierto valor de l en una capa, se dice que ocupan la misma *subcapa* y tienen casi idéntica energía, ya que la dependencia de la energía del electrón con los números m_l y m_s es comparativamente menor.

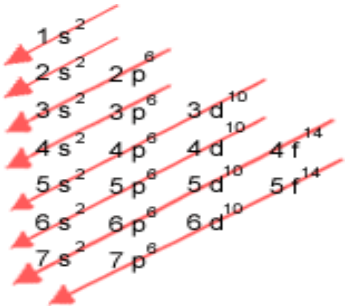


Figura V.1.3: Orden de llenado.

Cada subcapa se identifica mediante el número total n seguido de la letra correspondiente a su número cuántico orbital l. Un número con superíndice después de la letra identifica el número de electrones en la subcapa.

Los electrones en la misma subcapa con el mismo espín deben tener valores distintos de m_l.

Principio de máxima multiplicidad de Hund: Los electrones, al ocupar un subnivel, se distribuyen en el mayor número posible de orbitales de forma que sus espines sean paralelos (máxima multiplicidad o desapareamiento máximo); así, en el caso de los orbitales p (son tres: p_x, p_y, p_z) entrarán uno en cada orbital: $p_x^{\uparrow}$, $p_y^{\uparrow}$, $p_z^{\uparrow}$ y después, entrará el segundo electrón en cada orbital: $p_x^{\uparrow\downarrow}$, $p_y^{\uparrow\downarrow}$, $p_z^{\uparrow\downarrow}$.

Espectros ópticos de los átomos: Cada átomo es capaz de emitir o absorber radiación electromagnética, aunque solamente en algunas frecuencias que son características *propias* de cada uno de los diferentes elementos y compuestos químicos.

Si, mediante suministro de energía calorífica, se estimula un determinado elemento en su fase gaseosa, sus átomos emiten radiación en ciertas frecuencias del visible, que constituyen su espectro de emisión. Si el mismo elemento, también en estado de gas, recibe radiación electromagnética, absorbe en ciertas frecuencias del visible, precisamente las mismas en las que emite cuando se estimula mediante calor. Este será su espectro de absorción.

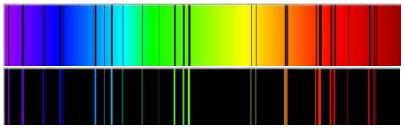


Figura V.1.4: Espectros del cadmio.

Ley de Kirchoff: Todo elemento absorbe radiación en las mismas longitudes de onda en las que la emite. Los espectros de absorción y de emisión resultan ser, pues, el negativo uno del otro.

Esquema de niveles de energía mostrando desdoblamiento y transiciones permitidas:

Átomo de hidrógeno: La figura muestra los diversos estados del átomo de hidrógeno, clasificados por su número cuántico total n y por su número cuántico de momento angular l. La regla de selección para las transiciones permitidas es aquí $\Delta l = \pm 1$. Como se ve por las transiciones representadas.

También se muestran las estructuras detalladas de los niveles $n = 2$ y $n = 3$; no solamente tienen distinta energía todos los subestados con el mismo n y distinto j, sino también los estados con el mismo n y j pero diferentes l. Este efecto es mucho más marcado para los estados con n y l pequeños.

Los estados energéticos del hidrógeno que poseen los mismos números cuánticos n y j, pero que difieren en el número cuántico l, como son los estados $2^2S_{1/2}$ y $2^2P_{1/2}$ están degenerados; así, la línea espectral H_α se desdobla $(n = 3 \rightarrow n = 2)$ en siete componentes muy juntas.

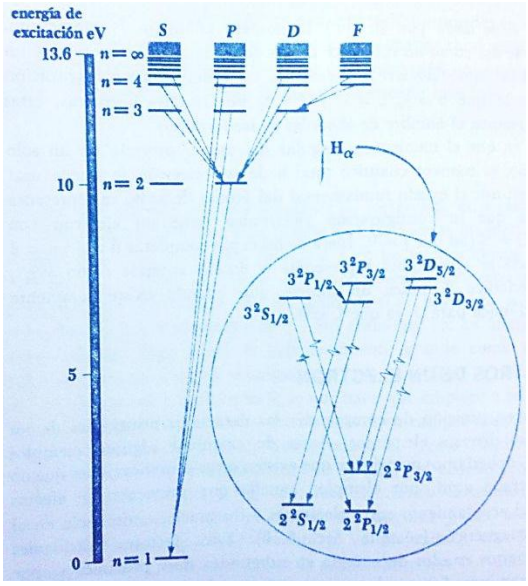


Figura V.1.5: Niveles de energía del hidrógeno.

Átomo de sodio: El átomo Na^{11} tiene un único electrón $3s$ fuera de las capas completas interiores, y así puede suponerse que sus otros 10 electrones neutralizan completamente la carga nuclear $+10e$, de modo que el electrón exterior está influido por una carga nuclear efectiva de $+e$, lo mismo que el átomo de hidrógeno.

Así que en primera aproximación los niveles de energía del sodio son muy parecidos a los del hidrógeno, excepto que el nivel más bajo corresponde a $n = 3$.

En la figura se muestra también los niveles del hidrógeno, donde se aprecia la concordancia sobre todo en los estados con valor de l más elevado.

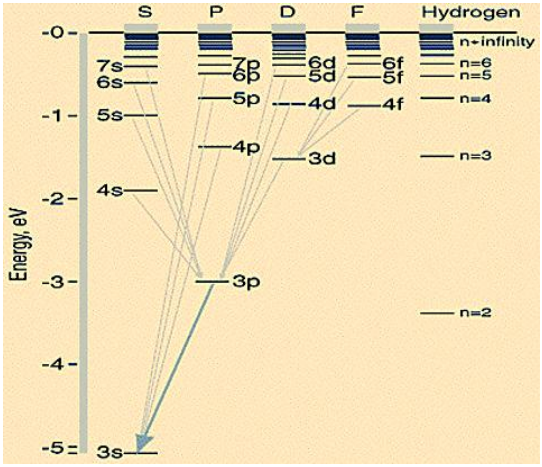


Figura V.1.6: Niveles de energía del sodio.

Espectros de dos electrones:

Átomo de helio, ortohelio y parahelio: En los átomos de hidrógeno y de sodio, un solo electrón es el responsable de los niveles de energía. Sin embargo, en el helio, hay dos electrones $1s$ en el estado fundamental, en el que interviene el efecto de acoplamiento $L - S$ en las propiedades y en el comportamiento del átomo de helio. Para ello considérese las reglas de selección permitidas:

$$\Delta \mathrm{L} = 0, \pm 1$$
$$\Delta \mathrm{J} = 0, \pm 1 \qquad \text{[V.1.13]}$$
$$\Delta S = 0$$

Cuando solo se considera a un electrón, entonces $\Delta \mathrm{L} = 0$ está prohibido, y $\Delta \mathrm{L} = \Delta l = \pm 1$ es la única posibilidad.

En la siguiente figura se representa el diagrama de niveles de energía del helio. Los diversos niveles presentan configuraciones en las que un electrón se encuentra en su estado fundamental y el otro en un estado excitado.

Estando un electrón en el estado base y otro excitado en el átomo de helio, y dado que los momentos angulares de los dos electrones están acoplados, es apropiado considerar los niveles como característicos del átomo entero. Se tienen tres diferencias importantes respecto de los átomo de un solo electrón:

Primero, existe la división entre estados singuletes y tripletes, que son estados en los que los espines de los dos electrones son antiparalelos (para dar $S = 0$) y paralelos (para dar $S = 1$) respectivamente. A causa de la regla de selección $\Delta S = 0$, ninguna de las transiciones permitidas puede tener lugar entre los estados singuletes y tripletes; el espectro del helio proviene de transiciones en una serie o en otra. Los átomos de helio en estados singuletes constituyen el *parahelio*, y aquellos otros en estado de triplete, el *ortohelio*.

Un átomo de ortohelio puede perder energía de excitación en un choque y convertirse en un átomo de parahelio, lo que también puede ocurrir al revés. Normalmente el helio líquido o gaseoso es una mezcla de ambos.

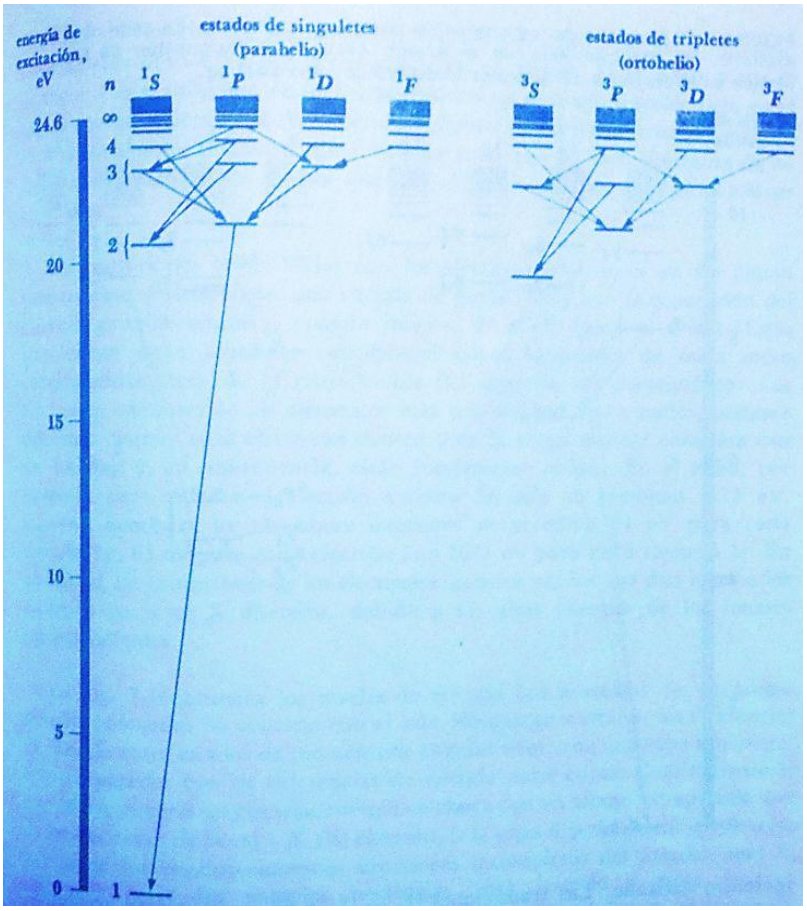


Figura V.1.7: Niveles de energía del helio.

Los estados de tripletes más bajos se llaman *metaestables*, porque en ausencia de choques, un átomo en uno de ellos puede retener su energía de excitación durante un tiempo relativamente grande (un segundo o más) antes de irradiarla.

La segunda particularidad es la ausencia del estado 1^3S como consecuencia del principio de exclusión ya que en este estado los electrones tendrían espines paralelos, y por tanto, números cuánticos idénticos.

Como tercera diferencia se tiene que la energía entre el estado fundamental y el estado excitado más bajo es relativamente grande, lo cual revela la compacta unión de los electrones de la capa completa. La energía de ionización del helio es de $24.6\ eV$, el más alto de todos los elementos.

Los espectros de rayos X: El espectro de rayos X de los anticátodos bombardeados por electrones rápidos presenta picos estrechos de longitudes de onda característicos del material del anticátodo, además de una distribución continua de longitudes de onda que descienden hasta un valor mínimo, inversamente proporcional a la energía de los electrones. El espectro de rayos X es el resultado de un fenómeno inverso al efecto fotoeléctrico, en el que la energía cinética del electrón se transforma en un fotón con una energía $h\nu$. Por otra parte, el espectro discreto se debe a las transiciones de los electrones dentro de los átomos que han sido perturbados por los electrones incidentes, se presentan con longitudes de onda de $\lambda \in [0.1\ \text{Å}, 100\ \text{Å}]$ y energías $E \in [100\ eV, 100\ keV]$.

Las transiciones relacionadas con los electrones exteriores de un átomo proporcionan normalmente una energía de pocos eV, y aun la separación del electrón exterior requiere, cuando mucho, $24.6\ eV$ (para el helio). Estas transiciones están asociadas con fotones cuyas longitudes de onda están comprendidas cerca de la parte visible del espectro electromagnético.

Los electrones interiores de los elementos más pesados sienten toda la carga nuclear completa sin blindaje, y en consecuencia, están fuertemente unidos. En el sodio, por ejemplo, para separar el electrón externo se requieren $5.13\,eV$ mientras que, para los electrones interiores, 31 eV para cada electrón $2p$, 63 eV para cada electrón $2s$ y 1,041 eV para cada electrón $1s$. En un átomo, las transiciones de los electrón internos son los que dan lugar a los espectros de rayos X discretos, debido a las altas energías de los fotones correspondientes.

Cuando un electrón choca con un átomo y desprende uno de los electrones de una de las capas internas ($K, L, M, ...$) otro electrón de una capa superior caerá al hueco (de la capa $K, L, M, ...$) cediendo la mayoría de su energía de excitación en forma de un fotón de rayos X y originando la línea correspondiente en el espectro. Las diferencias de energía entre estados de momento angular ($s, p, d, ...$) dentro de una capa son muy pequeñas en comparación con las diferencias de energía entre capas, por lo que no se suelen tomar en cuenta en las transiciones que originan los rayos X.

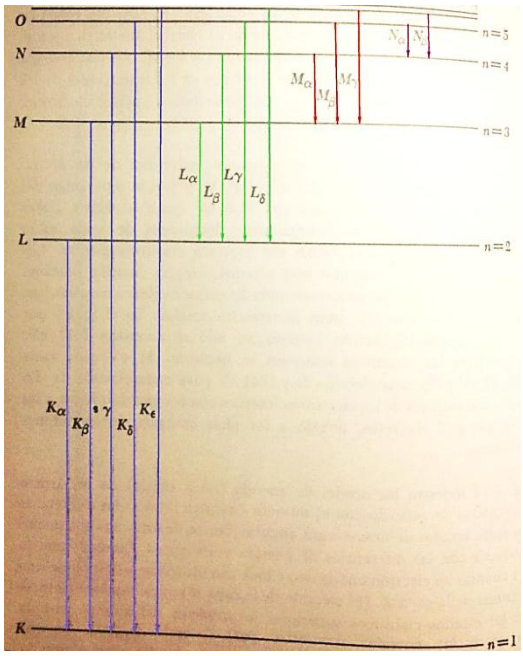


Figura V.1.8: Origen del espectro de rayos X.

Las series L de mayor longitud de onda se origina cuando un electrón L es arrancado y, del mismo modo la serie M cuando un electrón M es arrancado, etc. Los picos del espectro de rayos X del molibdeno son las líneas K_α y K_β de la serie K. La energía del fotón emitido es igual a la diferencia de energías entre los niveles de transición.

Efecto Auger: Es un fenómeno físico en el cual la desaparición de un electrón interno de un átomo causa la emisión de un segundo electrón. El segundo electrón emitido es llamado electrón Auger.

Un átomo que ha perdido un electrón interno puede también perder energía de excitación por este efecto, sin que haya emisión de un fotón de rayos X. En el efecto Auger, un electrón de la capa externa es arrancado del átomo al mismo tiempo que otro electrón de la misma capa cae a una interior incompleta; el electrón arrancado se lleva la energía de excitación del átomo en lugar de hacerlo un fotón. En cierto sentido, este fenómeno constituye un *efecto fotoeléctrico interno*, aunque el fotón nunca llega a estar realmente dentro del átomo.

El efecto Auger compite con la emisión de rayos X en la mayoría de los átomos, pero los electrones resultantes normalmente son absorbidos en el anticátodo, mientras que los rayos X emergen fácilmente y pueden ser detectados.

Metales alcalinos:

Los metales alcalinos básicamente, consisten de una coraza de gas noble inerte más un electrón en una subcapa externa. Son elementos situados en el $grupo$ 1 de la tabla periódica (excepto el hidrógeno que es un gas). En el estado base, contienen un conjunto de subcapas llenas, siendo la subcapa p la de mayor energía, y tienen un solo electrón *ópticamente* activo la subcapa s siguiente, con tendencia a perderlo (debido a que tienen poca afinidad electrónica, y baja energía de ionización), con lo que fácilmente forman un ion monopositivo. La configuración electrónica del grupo es ns^1, por ello se dice que se encuentran en la *zona* s de la tabla periódica. En procesos de baja energía, la energía de la coraza no cambia, por lo que la energía total del átomo será una constante, más la energía del electrón ópticamente activo.

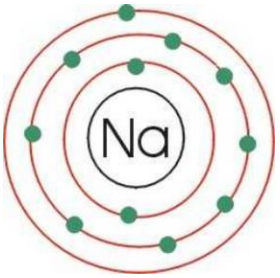


Figura V.1.9: Átomo alcalino.

En el análisis de los estados excitados de un átomo alcalino, es conveniente definir el cero de la energía total de un modo tal, que la energía total del átomo sea igual a la del electrón ópticamente activo.

Apantallamiento: Ya que el potencial $V(r)$ debido al núcleo y a los electrones de coraza en estos átomos es esféricamente simétrico, resulta fácil hacer el cálculo de los niveles de energía del electrón ópticamente activo considerando su dependencia de los números cuánticos n y l. Dada una energía n la energía es más negativa para el valor más pequeño de l ya que el electrón pasa más tiempo cerca del centro del átomo donde experimenta la carga nuclear total. Por ejemplo, en el estado base del átomo de ^3Li el electrón ópticamente activo se encuentra en la subcapa $2s$ y su energía es aproximadamente $2\ eV$ más negativa que la correspondiente al electrón $n = 2$ en el átomo de ^1H. En el primer estado excitado, el electrón ópticamente activo se encuentra en la subcapa $2p$ y su energía es solo aproximadamente de $0.2\ eV$ más negativa que la del electrón con $n = 2$ en el átomo de ^1H. Para el ^{11}Na la dependencia en l hace que el nivel $4s$ sea más negativo que el nivel $3d$.

Sin embargo, en las subcapas de radios grandes y valores grandes de n, la dependencia en l se vuelve menos importante, y los niveles de energía de los electrones ópticamente activos se encuentran muy próximos a los niveles de energía de un electrón en el átomo de ^{1}H.

La razón de esto se encuentra en que el apantallamiento de la carga nuclear $+Ze$ por la carga $-(Z-1)e$ de los electrones de coraza en los átomos alcalinos, se vuelve prácticamente completa para electrones en subcapas de radios grandes comparados con el radio de la coraza, de modo que el electrón experimenta esencialmente la misma interacción de Coulomb debido a una sola carga $+e$, que un electrón en el átomo de ^1H.

Figura V.1.10: Apantallamiento.

Efecto Zeeman: Las líneas del espectro óptico emitidas por los elementos alcalinos presentan un desdoblamiento de estructura fina que indican que todos los niveles de energía se duplican, excepto aquellos para los que $l = 0$. Esto se debe a la interacción espín-órbita que actúa sobre el electrón activo; es decir, debido al acoplamiento entre el momento dipolar magnético del electrón y el campo magnético interno que experimenta debido a que se mueve en el campo eléctrico del átomo.

Adicionalmente, cuando un átomo se coloca en un campo magnético externo y se excita, las líneas espectrales que emite en el proceso de desexcitación se desdoblan en varias componentes, lo que se conoce como *efecto Zeeman*. Para campos menores a varias décimas de tesla, el desdoblamiento es proporcional a la intensidad del campo. Para estos campos, el desdoblamiento Zeeman es menor que el desdoblamiento de la estructura fina, que es proporcional a la intensidad de los campos internos más fuertes del átomo.

En términos de la teoría moderna, estos desdoblamientos pueden explicarse en términos de los movimientos dipolares magnéticos de espín μ_s y orbital de los electrones ópticamente activos. Un átomo tendrá un *momento dipolar magnético total*, μ excepto cuando se encuentre en un estado $^1S_0$ (los electrones que se encuentran en subcapas completamente llenas no tienen momentos dipolares magnéticos netos).

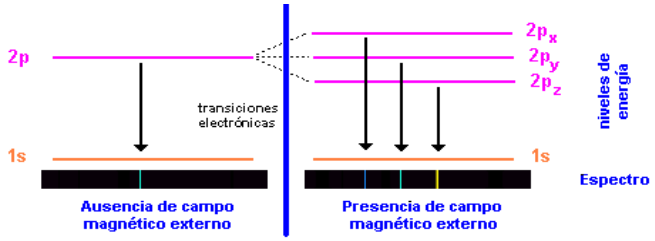


Figura V.1.11: Efecto Zeeman.

Cuando este momento dipolar magnético del átomo se encuentre en un campo magnético externo $\boldsymbol{B}$ tendrá la energía potencial:

$$\Delta E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} \qquad \text{[V.1.14]}$$

Cada uno de los niveles de energía se desdoblará en varias componentes discretas correspondientes a los diversos valores de ΔE asociados con las diferentes orientaciones cuánticas de μ respecto a la dirección de $\boldsymbol{B}$.

Láser (*light amplification by stimulated emission of radiation*):

Absorción, emisión espontánea y estimulada: Entre dos niveles de energía en un átomo, uno inferior E_1 y uno superior E_2 pueden ocurrir tres clases de transiciones que implican radiación electromagnética. Si el átomo se encuentra inicialmente en el estado energético 1 se puede elevar al estado 2, absorbiendo un fotón de luz cuya energía es $h\nu = E_2 - E_1$. Este proceso recibe el nombre de absorción inducida. Si el átomo se encuentra inicialmente en el estado superior 2, puede caer al estado inferior 1 emitiendo un fotón de energía $h\nu$. En este caso se trata de una emisión espontánea.

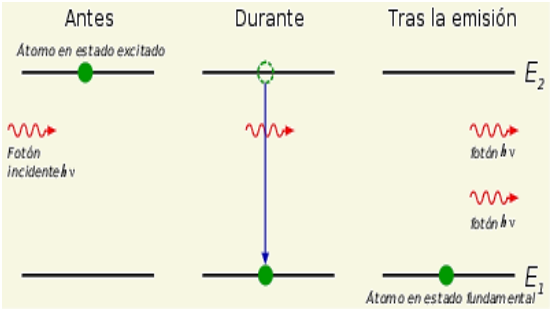


Figura V.1.12: Emisión inducida.

Existe también una tercera posibilidad. La *emisión inducida o estimulada*, en la que un fotón incidente de energía $h\nu$ causa una transición, desde el estado superior hasta el inferior. La emisión inducida no implica conceptos nuevos. Se puede comparar con un oscilador armónico; por ejemplo, un péndulo, al que se le aplica una fuerza sinusoidal cuyo periodo es el mismo que su periodo natural de vibración. Si la fuerza aplicada se encuentra exactamente en fase con las oscilaciones del péndulo, la amplitud de estas aumenta; esto corresponde a la absorción inducida de energía. Sin embargo, si la fuerza aplicada está fuera de fase en 180° con las oscilaciones del péndulo, la amplitud de estas disminuye; esto corresponde a una emisión inducida de energía.

Principio de funcionamiento: Ya que $h\nu$ es generalmente mucho mayor que kT en el caso de las radiaciones atómicas y moleculares, en equilibrio térmico, la población de estados superiores de energía en un sistema es considerablemente inferior a la población de los estados más bajos. Así pues, supóngase que incide luz de frecuencia ν sobre un sistema en el que la diferencia de energía entre el estado base y el excitado es $h\nu$. Si el estado superior está muy poco ocupado, habrá poca emisión estimulada y absorción de los fotones incidentes por los átomos en el estado fundamental y la subsiguiente radiación espontánea de fotones de igual frecuencia. Algunos sistemas atómicos pueden tener poblaciones *invertidas* de niveles de energía con un estado superior ocupado en mayor grado que el estado base E_0. Teniendo un sistema con tres (o más) niveles, en el que el nivel intermedio E_1 es metaestable; es decir que su transición al estado base está prohibida por las reglas de selección, el sistema puede "elevarse" hasta el estado E_2 mediante una radiación de frecuencia $\nu' = (E_2 - E_0)h$.

Los electrones en el estado E_2 tienen una existencia de $\sim 10^{-8}\ s$ antes de realizar una emisión espontánea y caer al nivel intermedio o al estado base. Los estados metaestables pueden tener una vida media superior a un segundo, por consiguiente, se puede continuar elevando el nivel energético hasta que haya una población mayor en el estado E_1 de lo que hay en el estado E_0.

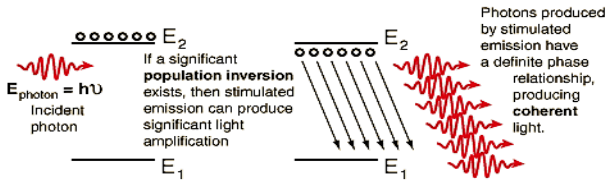


Figura V.1.13: Inversión de población.

Si se hace llegar una radiación directa de frecuencia $\nu = (E_1 - E_0)h$ la emisión inducida de fotones de esta frecuencia excederá a la absorción, puesto que en el sistema hay más átomos en el estado superior, y el resultado neto será una producción coherente de radiación de frecuencia ν mayor que la que llega.

Un láser común es un tubo lleno de gas o un sólido transparente con espejos en ambos extremos, uno parcialmente transmisor para que salga algo de la luz que se produce. La luz impulsora se dirige hacia el medio activo, desde los bordes del tubo, mientras las ondas transversales que van y vienen pertenecientes a la luz atrapada estimulan emisiones de frecuencia ν que mantienen el haz emergente colimado.

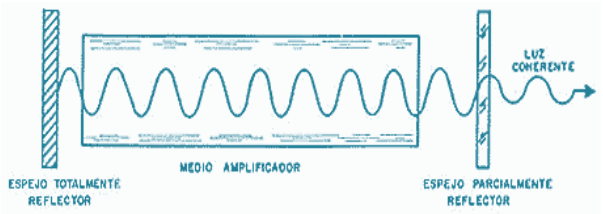


Figura V.1.14: Tubo Láser.

Descripción sobre una la base de un ejemplo específico, Laser de He-Ne:

Un láser de helio-neón, o láser $HeNe$, es un tipo de láser de gas que utiliza como medio activo una mezcla gaseosa de helio y neón. Los láseres de helio-neón emiten, habitualmente, a una longitud de onda de 633 nm y, por lo tanto, en luz visible de color rojo. Son un tipo de láser habitual en aplicaciones industriales y científicas.

El proceso de emisión en un láser de helio-neón se inicia con las colisiones de los electrones procedentes de la descarga eléctrica con los átomos de helio del gas. Este hecho excita los átomos de helio que pasan del estado fundamental a los estados excitados metaestables 2^3S_1 y 2^1S_0.

Por otro lado, las colisiones de los átomos de helio excitados con los átomos de neón en el estado fundamental excitan estos últimos y los hace subir hasta el nivel $5s$. Esto es debido a una coincidencia de los niveles energéticos de los átomos de helio y los de neón. El proceso se puede representar con la siguiente ecuación de reacción:

$$He^* + Ne \rightarrow He + Ne^* + \Delta E \qquad \textbf{[V.1.15]}$$

Donde * representa un estado excitado y ΔE la pequeña diferencia de energía entre los estados excitados de ambos átomos, que es de unos 0.05 eV.

Diagrama energético, procesos y transiciones energéticas involucradas:

El número de átomos de neón excitados aumenta a medida que se van produciendo más colisiones entre átomos de helio y átomos de neón, hasta obtener una inversión de población entre los niveles electrónicos del neón $5s$, $3p$ y otros. La emisión estimulada y la emisión espontánea correspondiente a la desexcitación del estado $5s$ ($^2P_{1/2}$) al $3p$ ($^2P_{1/2}$) provoca la emisión de luz de longitud de onda 632,991 nm, el habitual de los láseres de helio-neón. Después de esta transición láser se produce una rápida caída del nivel $3p$ al estado fundamental $2p$ gracias a las colisiones de los átomos de neón con las paredes del recipiente. Debido a este proceso necesario, el tubo láser no puede ser muy grande y, por lo tanto, los láseres de helio-neón tienen una limitación en tamaño y en potencia.

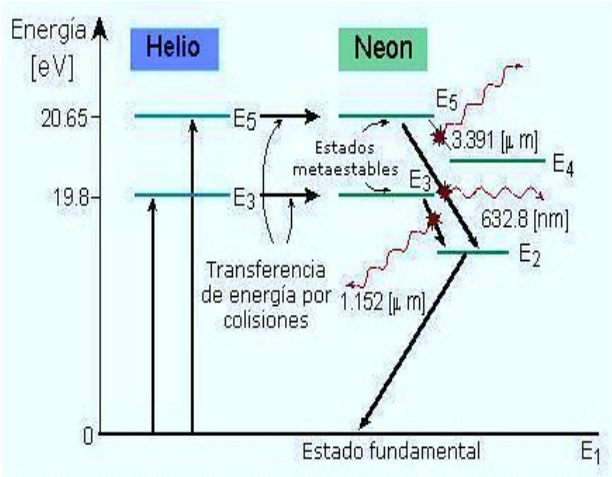


Figura V.1.15: Láser de Helio-Neón.

Con una precisa selección de los espejos de la cavidad un láser de helio-neón puede emitir en otras longitudes de onda. Hay transiciones infrarrojas a 3,39 μm y a 1,15 μm, así como varias transiciones en el visible: una emisión en el verde (543,5 nm, denominada el *láser GreeNe*), una emisión en el amarillo (594 nm) y una emisión en el naranja (612 nm). La longitud de onda habitual de 633 nm en realidad tiene una ganancia muy inferior a algunas de estas otras, como las infrarrojas, pero estas se pueden suprimir de forma efectiva utilizando determinados recubrimientos en los espejos.

El ancho de banda del láser está dominado por el ensanchamiento Doppler y es bastante estrechado para la transición de 633 nm (1,5 GHz). Este hecho, junto con la emisión en el visible y una calidad del haz excelente, hacen del láser de helio-neón una fuente de luz muy útil en holografía y en espectroscopia. Antes de la invención de los diodos láser eran los láseres utilizados en lectores de códigos de barras.

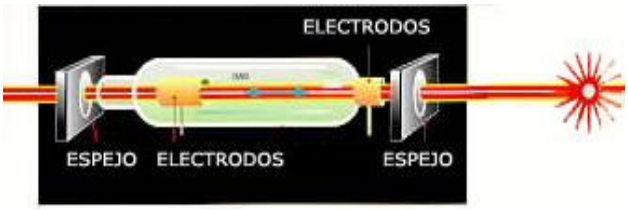
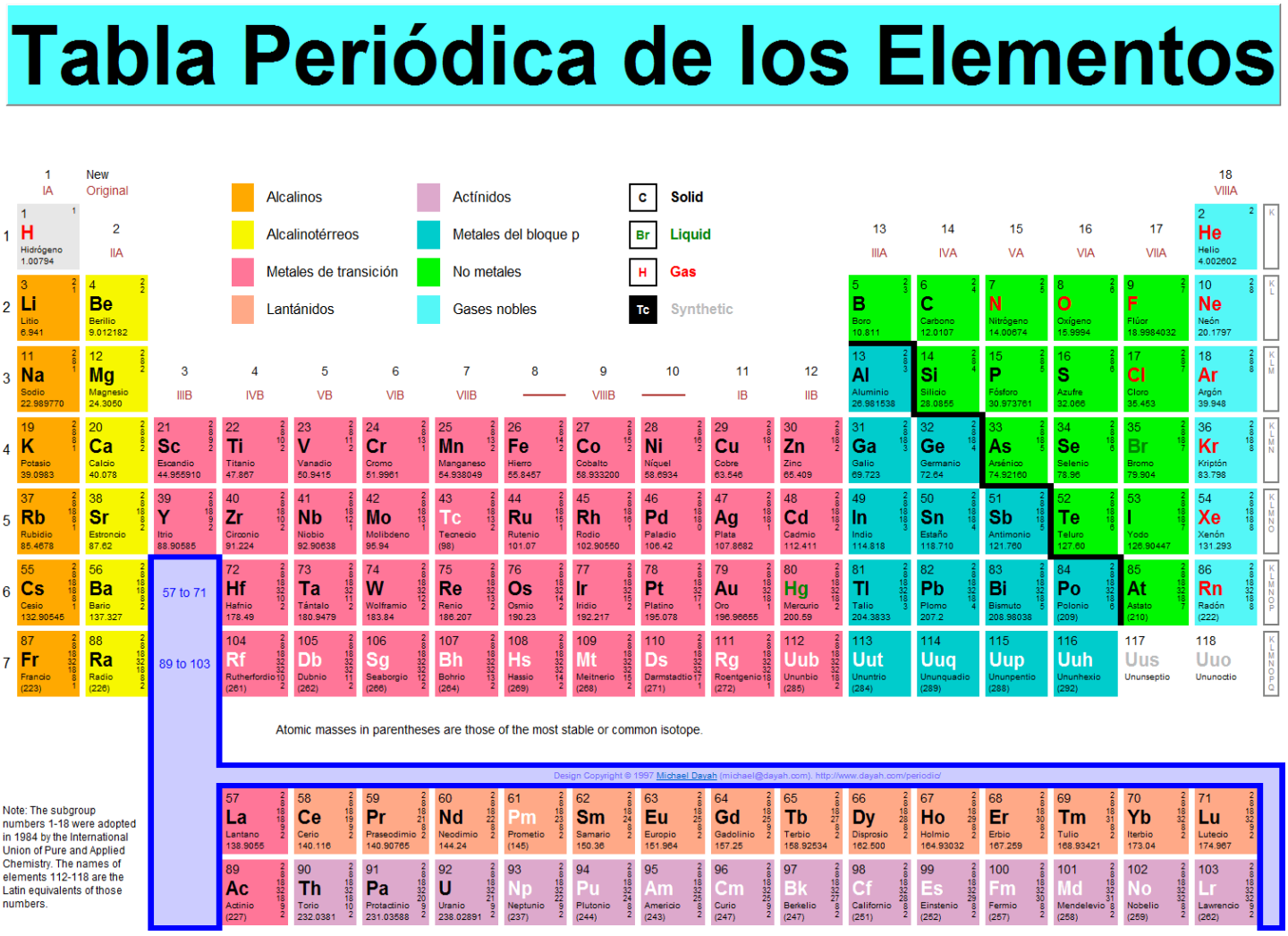


Figura V.1.16: Tubo Láser de helio-Neón.

Tabla periódica de los elementos:

Cuando se ordenan los elementos por su número atómico (que se encuentra señalado arriba del símbolo correspondiente), los que tienen propiedades químicas y físicas similares aparecen a intervalos regulares según la *ley periódica*. Los elementos con propiedades similares forman los grupos que constituyen las columnas verticales. Así el *grupo IA* está formado por el hidrógeno y los *metales alcalinos* que tienen toda una gran actividad química y *valencia* $+1$. El *grupo VIIA* lo constituyen los *halógenos*, que no son muy activos, volátiles y de valencia -1 y forman moléculas diatómicas en estado gaseoso. El *grupo VIIIA* lo forman los gases *inertes* que son tan inactivos que no solamente casi nunca forman compuestos con otros elementos sino que sus átomos no se unen entre sí en moléculas.

Las líneas horizontales se llaman *periodos*. A través de cada periodo hay una transición más o menos uniforme, desde un metal activo hasta un gas inerte, pasando por metales menos activos, no metales débilmente activos y no metales muy activos. En cada columna hay también cambios regulares en las propiedades, pero son menos notables que las de los periodos. Por ejemplo, el aumento de número atómico en los metales alcalinos está acompañado por una mayor actividad química, mientras que el fenómeno inverso se presenta en los halógenos.



Una serie de elementos de transición aparece en cada periodo, entre los elementos de los grupos *II* y *III*. Los elementos de transición son metales con un parecido químico notable entre sí, pero no con los elementos de los grupos mayores. Quince de los elementos de transición del *periodo* 6 son virtualmente indistinguibles por sus propiedades, y se les conoce como *lantánidos* o *tierras raras*. Un grupo similar de metales muy vinculados entre sí, lo constituyen los *actínidos*, que se encuentran en el *periodo* 7.

Variaciones periódicas de las propiedades de los elementos:

Radio atómico: En los átomos el radio atómico aumenta a medida que los electrones ocupan capas más alejadas del núcleo. Siguiendo el orden de los elementos en la tabla periódica, en una familia, el radio atómico aumenta de abajo a arriba y en un periodo, éste disminuye de izquierda a derecha debido a que cuanto mayor es la carga efectiva del núcleo, atrae a los electrones con mayor fuerza.

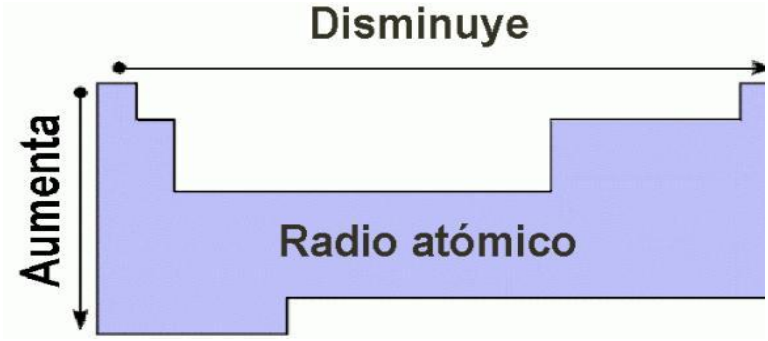


Figura V.2.1: Variaciones periódicas del radio atómico.

Energía de ionización: Es la energía mínima (en kJ/mol) que se requiere para quitar un electrón de un átomo en estado gaseoso, en su estado fundamental. Su magnitud es una medida de qué tan fuertemente está unido el electrón al átomo. Para los átomos poli electrónicos, la cantidad de energía requerida para quitar el primer electrón del átomo, en su estado fundamental, se denomina *primera energía de ionización* y se denota con: $EI1$.

Además, se verifica que se requiere cada vez más energía para arrancar a los electrones sucesivos; es decir: $EI1 < EI2 < EI3$.

A medida que aumenta el radio atómico en un grupo dado, la primera energía de ionización disminuye porque los electrones están más alejados del núcleo.

La carga nuclear efectiva del núcleo aumenta de izquierda a derecha en cada periodo; así, los electrones más externos son atraídos con mayor fuerza, esto hace que sean más difíciles de separar del átomo.

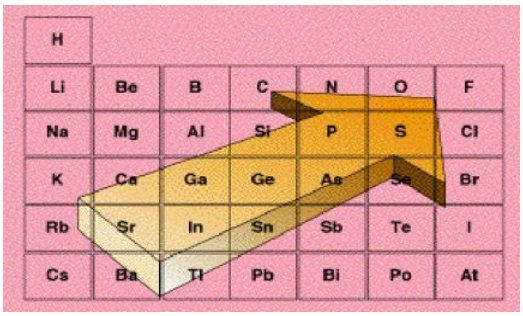


Figura V.2.2: Energía de ionización.

Los elementos que poseen baja energía de ionización forman compuestos por pérdida de electrones y dan lugar a la formación de *cationes*. Los elementos que poseen energía de ionización intermedia forman compuestos moleculares al compartir electrones con otros elementos. Los elementos que poseen una energía de ionización muy alta suelen ganar electrones y formar *aniones*.

Electronegatividad: Es una medida de la tendencia relativa de un átomo a atraer electrones hacía sí mismo cuando está combinado químicamente con otro átomo.

Dos elementos con electronegatividades muy distintas, por ejemplo un metal y un no-metal, reaccionan entre sí para formar un compuesto iónico.

Dos elementos con electronegatividades semejantes; por ejemplo, un no-metal y otro no-metal, tienden a formar enlaces covalentes entre sí.

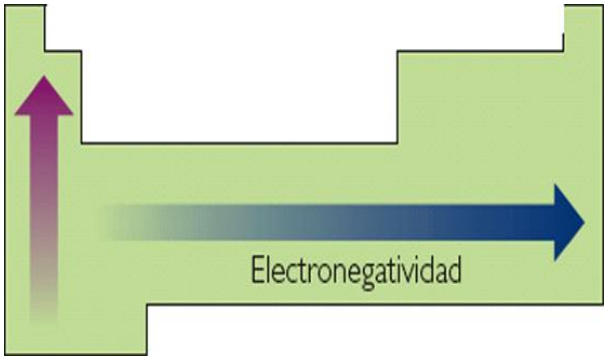


Figura V.2.3: Periodicidad de la electronegatividad.

PROBLEMAS: Átomos multielectrónicos

1. Determinar la forma de una función propia total simétrica normalizada para un sistema de tres partículas en el que las interacciones entre las partículas se desprecian.

Solución: La función total propia constará de todas las permutaciones y como es simétrica, todos los signos serán positivos, de modo que se tiene:

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{3!}}[\psi_\alpha(1)\psi_\beta(2)\psi_\gamma(3) + \psi_\beta(1)\psi_\gamma(2)\psi_\alpha(3)$$
$$+ \psi_\gamma(1)\psi_\alpha(2)\psi_\beta(3) + \psi_\gamma(1)\psi_\beta(2)\psi_\alpha(3)$$
$$+ \psi_\beta(1)\psi_\alpha(2)\psi_\gamma(3) + \psi_\alpha(1)\psi_\gamma(2)\psi_\beta(3)]$$

Inmediatamente es evidente que esta combinación lineal es simétrica respecto al intercambio de cualesquiera dos marcas de las partículas. ■

2. Determinar los valores de Z_n para el átomo de argón y utilizar estos valores para estimar la energía total de los electrones de las tres capas que se encuentran ocupadas en el estado base del átomo.

Solución: El argón tiene número atómico 18, de modo que sus electrones están distribuidos en tres capas, en la primera capa 2 electrones y en la segunda y tercera, 8 en cada una.

La Z efectiva para la primera capa es $Z_1 \cong 16$, ya que para los átomos multielectrónicos Z_1 tiene un valor de aproximadamente $Z_1 \approx Z - 2$, ya que, en todos los átomos, una esfera en torno al núcleo, con radio igual a la coordenada radial promedio de un electrón en la capa $n = 1$ contiene una carga negativamente aproximadamente de $-2e$ que hace un efecto de apantallamiento. Para la segunda capa se puede tomar $Z_2 \cong 8$, si se piensa que hay 10 átomos que ejercen un efecto de apantallamiento. Y finalmente para la tercera capa, $Z_3 \cong 3$, ya que los electrones de esta capa quedan casi completamente escudados de la carga nuclear, aunque el escudo de los electrones que intervienen no es perfecto, de modo que en primera aproximación se tiene que en todos los átomos multielectrónicos $Z_n \approx n$, si n especifica la capa más externa ocupada en el átomo.

Así que, usando la fórmula para el átomo con un electrón y sustituyendo $Z = Z_n$:

$E \cong -\frac{\mu Z_n^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} = -\left(\frac{Z_n}{n}\right)^2 \times 13.6\ eV$; de donde: $E_1 \cong -\left(\frac{16}{1}\right)^2 \times 13.6\ eV = -3500\ eV$,

$E_2 \cong -\left(\frac{8}{2}\right)^2 \times 13.6\ eV = -220\ eV$, $E_1 \cong -\left(\frac{3}{3}\right)^2 \times 13.6\ eV = -14\ eV$. ■

3. Estimar el voltaje de aceleración mínimo necesario para que un tubo de rayos X con un ánodo de ^{26}Fe emita una línea K_α de su espectro, así mismo estimar la longitud de onda de un fotón K_α.

Solución: Para estimar la energía de excitación de un átomo de ^{26}Fe con un agujero en la capa K puede utilizarse de manera burda ($Z_n = Z_1 = Z - 2$) la fórmula:

$E_K \cong +\frac{\mu Z_n^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} = 13.6\left(\frac{Z_n}{n}\right)^2 eV = 13.6 \times (24)^2\ eV = 7.8\ eV$; por lo que $V \sim 7.8\ eV$

Cuando el átomo emite un fotón K_α el agujero queda en la capa L y su energía es (tomando $n = 2$): $E_L \cong 13.6\left(\frac{Z_n}{n}\right)^2 eV = 13.6 \times (26 - 10)^2\ eV = 8.7\ eV$; y entonces el fotón tendrá energía $h\nu = E_K - E_L$. ■

VI. MOLÉCULAS

VI.1 ENLACES:

Los átomos se combinan para formar moléculas, que también presentan estados de excitación, absorben y emiten radiación. Los espaciamientos entre los átomos de las moléculas son del orden de $0.1\ nm = 10$ Å y sus energías de enlace de los electronvoltio; lo cual se espera para las órbitas electrónicas, de modo que las fuerzas que ligan a las moléculas se originan en los electrones. Sobreponiéndose a las fuerzas de repulsión coulombiana (entre los núcleos y entre los electrones) las distribuciones de densidad de probabilidad controlan la naturaleza de los enlaces moleculares y también las propiedades de las moléculas.

Las densidades de probabilidad de las funciones atómicas de onda definen los orbitales moleculares independientemente de que estos estados cuánticos sean ocupados o no por los electrones.

El ion molecular de hidrógeno:

El ion molecular de hidrógeno H_2^+ se obtiene al sacar un electrón de la molécula de hidrógeno H_2, de modo que el electrón restante está compartido por los dos iones girando alrededor de ellos. El electrón permanece la mayor parte del tiempo entre ambos protones, de esa manera atrae a cada protón y la molécula se liga, ya que la fuerza de atracción $2e^2/4\pi\epsilon_0(R/2)^2$ es mayor que la repulsiva $e^2/4\pi\epsilon_0 R^2$.

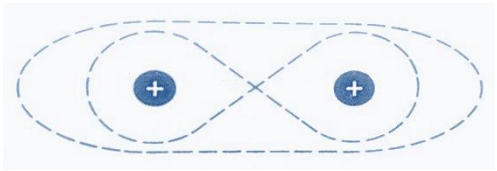


Figura VI.1.1: Órbitas posibles en el H_2^+

Los dos protones forman una especie de doble pozo de potencial, el electrón viaja mediante el efecto túnel de un pozo a otro. Los protones estarán tan cerca como para que el electrón se encuentre con igual probabilidad en cualquier pozo, y por tanto, ligado a cualquier protón. La mecánica ondulatoria describe exactamente este caso, para ello basta sumar las funciones de onda de electrón en ambos pozos.

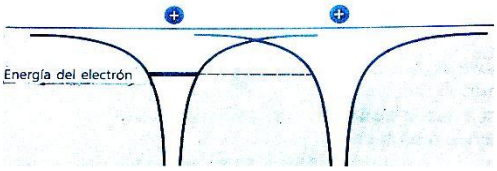


Figura VI.1.2: Doble pozo de potencial.

También se puede ver este proceso como una superposición coherente de las dos ondas electrónicas de los dos átomos distintos; se suman primero los desplazamientos de onda y luego se elevan al cuadrado para encontrar la intensidad; este proceso proporciona la interferencia constructiva en algunos puntos y la destructiva en otros.

Al sumar las funciones de onda, pueden tener el mismo signo o signos opuestos, lo cual tiene un efecto apreciable sobre la distribución dada por ψ^2. En el primer caso el electrón tiene una probabilidad grande de encontrarse en la región entre los dos protones; en el otro, tiene una probabilidad pequeña de encontrarse ahí. Solo en el primer caso es cuando se espera que se forme la ligadura.

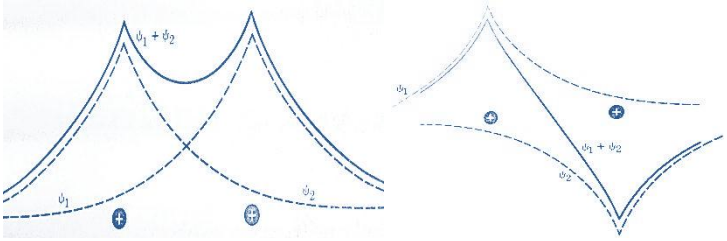


Figura VI.1.3: Traslape de las funciones de onda para el H_2^+.

Cuando los dos protones se encuentran muy separados la energía del electrón es $-13.6\ eV$ y la energía de repulsión de Coulomb V_p entre los protones es muy pequeña y se puede despreciar. A medida que los protones se acercan V_p aumenta y la energía del electrón disminuye ya que siente una fuerza neta más grande y su función de onda se aproxima a la de un átomo con $Z = 2$. Cuando las funciones de onda tienen el mismo signo, ψ tiene un máximo en $R \to 0$ y por lo tanto corresponderá al estado $1s$ el átomo con $Z = 2$. Así que, como $E_n = (-13.6)Z^2/n^2$ para los átomos hidrogenoides, su energía será $E_+ = -54\ eV$. Así pues, $V_p + E_+$ tiene un mínimo

en $R = 1.06\ \text{Å} \cong 2a_0$ y una energía de ligadura $E_{total}(R = \infty) - E_{total}(R = 1.06\ \text{Å}) = 2.7\ eV$. En el caso en que las funciones de onda tienen signo contrario, $E_{-} = -13.6\ eV$ para $R \to 0$ y también para $R \to \infty$, no hay un mínimo y no se tiene un sistema estable.

La molécula de hidrógeno y el enlace covalente:

Considérese dos átomos de hidrógeno separados una distancia muy grande. Con cada átomo se encuentra asociado un orbital electrónico $1s$, con una energía de $-13.6\ eV$, ya que los átomos se encuentran alejados entre sí no hay interacción entre los electrones. A medida que se van juntando para formar una molécula de H_2, se empiezan a traslapar las funciones de onda, de modo que los átomos "comparten" los electrones. Los estados electrónicos separados e individuales de los dos átomos se vuelven ahora estados *moleculares* con orbitales y números cuánticos asociados.

Cuando se reduce la separación entre los núcleos atómicos aún existen dos estados electrónicos pero ahora con energías diferentes. Un estado corresponde a la suma de las dos funciones lo que genera un *orbital de enlace* donde los dos electrones ocupan con mayor probabilidad la región central (con espines antiparalelos) de la molécula estable H_2. Los electrones entonces se comparten en la molécula, lo que se conoce como *enlace covalente*. El otro estado corresponde a la diferencia de las dos funciones de onda, lo que genera un *orbital de antienlace* y conduce a una molécula inestable.

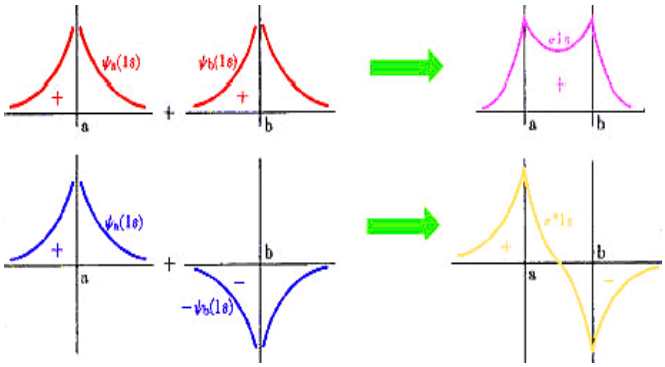


Figura VI.1.4: Orbitales de enlace y antienlace.

La teoría de Lewis describe el enlace $H - H$ en función del apareamiento de los dos electrones de los átomos de hidrógeno. Según la teoría del enlace valencia, el enlace covalente $H - H$ se forma por el traslape de los orbitales $1s$ de los átomos de H. El orbital de enlace tiene una energía más baja que la que tenían los átomos por separado, de modo que se obtiene un estado ligado. La energía del orbital de enlace para el H_2 tiene un mínimo en $E = -31.7\ eV$ a $R = 0.74$ Å, así que la energía de enlace es: $E = -31.7.2\ eV - (-27.2\ eV) = -4.5\ eV$.

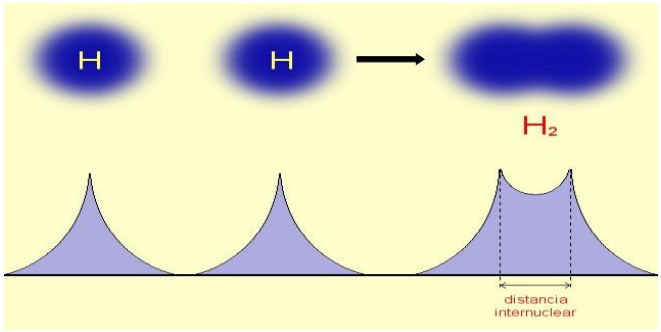


Figura VI.1.5: Enlace covalente $H - H$.

Este tipo de enlace aparece más frecuentemente en las moléculas que contienen dos átomos idénticos. Las restricciones del principio de Pauli se aplican a los orbitales moleculares de igual modo que a los orbitales atómicos; cada orbital molecular tiene una capacidad máxima de ocupación de dos electrones, los cuales corresponden a las dos orientaciones distintas del espín.

Molécula de helio ionizado: Para el caso del helio se tiene que no forma una molécula de He_2 con cuatro electrones, dos en el orbital de enlace y dos en el de antienlace. El efecto neto es que no se forma una molécula estable. Sin embargo, el He_2^+ es estable con dos electrones de enlace y uno de antienlace. La energía de ligadura de esta molécula es $E = -3.1\ eV$ y la separación es de 1.08 Å. Valores extraordinariamente cercanos al del H_2^+.

Otras moléculas con enlace covalente:

Otros sistemas hidrogenoides (Li_2, Na_2, etc.) con un solo electrón s forman también moléculas estables a través de un enlace covalente. Los átomos con electrones de valencia en los orbitales p (O_2, N_2, etc.) pueden formar también moléculas diatómicas por medio de enlaces covalentes. Ya que hay tres orbitales atómicos p_x, p_y, p_z (perpendiculares entre sí) que corresponden a los valores de $m_l = +1, -1, 0$ respectivamente, hay seis orbitales moleculares.

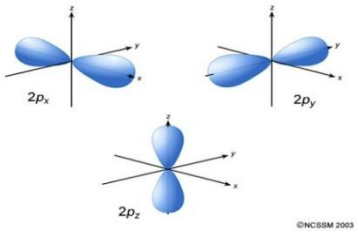


Figura VI.1.6: Orbitales atómicos p.

Enlaces covalentes $p - p$: Considérese dos átomos con capas $2p$, al aproximarse, los orbitales atómicos $1s$ y $2s$ se transformarán en dos orbitales moleculares $1s$ y $2s$ cada uno de ellos, uno de enlace y uno de antienlace. Como las capas están llenas se tendrá un total de cuatro electrones $1s$ y otros cuatro $2s$; es decir que los orbitales de enlace y antienlace estarán llenos a toda su capacidad. El enlace molecular dependerá fundamentalmente de los orbitales p ya que es la capa que está semillena. Así se formarán orbitales de enlace y antienlace para p_x, p_y, p_z. Sin embargo, el orbital de enlace que se encuentre a lo largo de la dirección de acercamiento serán el más críticamente afectado y por tanto el de menor energía, mientras que los otros conservarán sus energías.

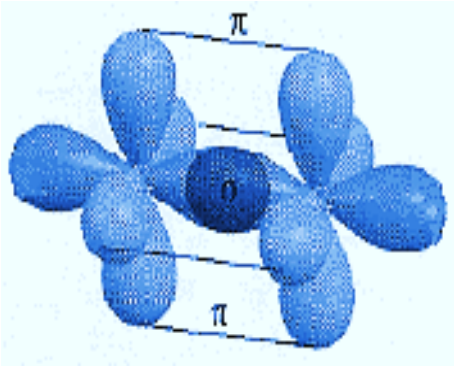


Figura VI.1.7: Enlace covalente $p_x - p_x$

Por ejemplo, en el caso del nitrógeno, que tiene siete electrones en total, cada uno de los orbitales p establecerá un orbital de enlace o ligadura con dos electrones, de modo que la molécula diatómica es muy estable, con una energía de ligadura de $E = -9.8\ eV$ y una separación de 1.1 Å. Esta estabilidad de la molécula N_2 se expresa con una reactividad muy baja en muchas circunstancias.

Para el caso del oxígeno con cuatro electrones p se tiene que tres de ellos formaran orbitales de enlace y uno de antienlace, por lo que su molécula diatómica es más inestable que la del nitrógeno; la energía de enlace del O_2 es $E = -5.1\ eV$ y su separación es de 1.2 Å. Así que, las ligaduras del oxígeno molecular se pueden romper más fácilmente. Por ejemplo, con la oxidación de los metales expuestos al aire.

Enlaces covalentes $s - p$: Muchas veces sucede que dos átomos forman una molécula estable, uno con un electrón de valencia en estado $1s$ y el otro con uno o más electrones de valencia en estado p. Ese es el caso de la molécula HF. El átomo de flúor, F^9, cuenta con cinco electrones en la capa p de modo que al acercarse los átomos de hidrógeno y de flúor, aumentará la probabilidad de que se forme un orbital de enlace sp. También es posible tener orbitales sp de antienlace, que resultan de sumar las funciones de onda del hidrógeno y del flúor con signos contrarios.

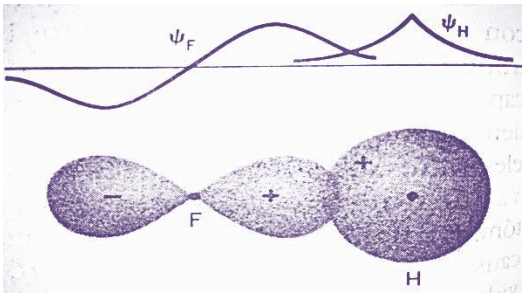


Figura VI.1.8: Superposición orbitales s y p.

Considérese ahora la molécula de agua, H_2O, el oxígeno tiene ocho electrones, cuatro de los cuales ocupan la capa $2p$, de modo que cuenta con dos orbitales p desapareados, cada uno de los cuales puede formar un enlace con un electrón $1s$ de hidrógeno para constituir la molécula. El ángulo esperado entre los dos enlaces sp es de 90° pero experimentalmente se observa aproximadamente de 104.5°, lo cual se debe a la repulsión de Coulomb.

Orbitales híbridos $s-p$: Se pueden describir como mezclas de orbitales que ya no pueden identificarse como s o p propiamente, lo cual resulta en una gran diversidad en la clase y complejidad de las moléculas que conforman. La formación de híbridos s y p es generalmente como sigue: En un átomo con la configuración $2s^2 2p^n$, uno de los electrones $2s$ se excita y cae en la capa $2p$, produciendo una configuración $2s2p^{n+1}$. Este es el caso de los orbitales moleculares sp^3 en la molécula CH^4. La molécula de metano así formada tiene geometría tetraédrica con ángulos entre orbitales de un poco más de 109°. Los orbitales híbridos se denotan como sp, sp^2, sp^3, etc. según la contribución de uno de los átomos a la distribución electrónica de ligadura.

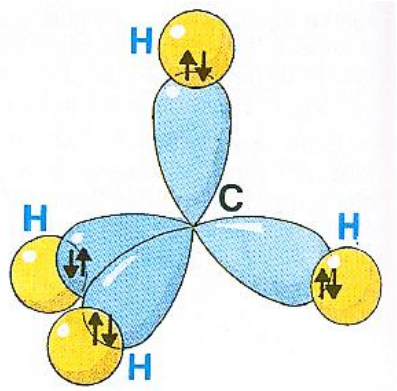


Figura VI.1.9: Molécula de metano.

El enlace iónico:

La molécula de NaCl: Supóngase que se tiene un átomo neutro de sodio, $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s$, con un electrón $3s$ fuera de una capa cerrada, y un átomo neutro de cloro, $1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ 3p^5$, al cual le falta un electrón para cerrar la capa $3p$. Para extraer el electrón exterior del sodio se requiere $5.14\ eV$, la *energía de ionización* del sodio, y lo que queda es un ion de sodio cargado positivamente. Luego si el electrón se coloca en el átomo de cloro, creando un ion de cloro con carga negativa, la energía liberada es de $3.61\ eV$, la *afinidad electrónica* del cloro. La energía se libera debido a que la capa llena $3p$ es una configuración especialmente estable.

Se pueden obtener los $1.53\ eV = 5.14\ eV - 3.61\ eV$ restantes acercando el cloro y el sodio lo suficiente como para que su energía coulombiana de atracción sea de $1.53\ eV$. Esta distancia se puede calcular considerando que: $V = e^2/4\pi\epsilon_0 R$, de modo que:

$$R = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 V} = \frac{1.44\ eV \cdot nm}{1.53\ eV} = 0.941 = 9.41\ \text{Å}$$

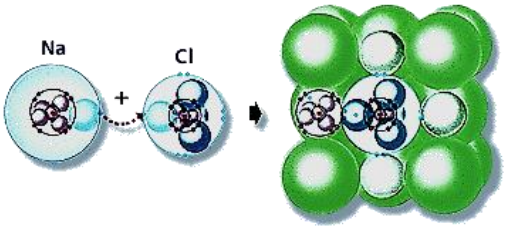


Figura VI.1.10: Cloruro de sodio.

Esto es, mientras que el Na^+ y el Cl^- se encuentren a menos de 9.41 Å de distancia, la atracción coulombiana suministra energía suficiente para vencer la diferencia entre la energía de ionización del sodio y la afinidad electrónica del cloro.

Sin embargo, si se acercan mucho los iones Na^+ y el Cl^- las capas llenas $2p$ del sodio y $3p$ del cloro empezarán a traslaparse, y debido al principio de Pauli los electrones de estas capas pasarían a capas más altas demandando una mayor energía al sistema $Na^+ + Cl^-$ para reducir la separación de los iones, lo cual puede considerarse como una energía potencial de repulsión que aumenta rápidamente a medida que se trata de forzar a que los iones se juntes más. En suma, cuando los iones se encuentran lejos, se atraen entre sí y cuando se encuentran muy juntos se repelen uno al otro. La posición de equilibrio determina el tamaño de la molécula iónica. En cloruro de sodio la separación de equilibrio es de 2.36 Å y a esa distancia la energía es de $-4.26\ eV$, que es la *energía de disociación*.

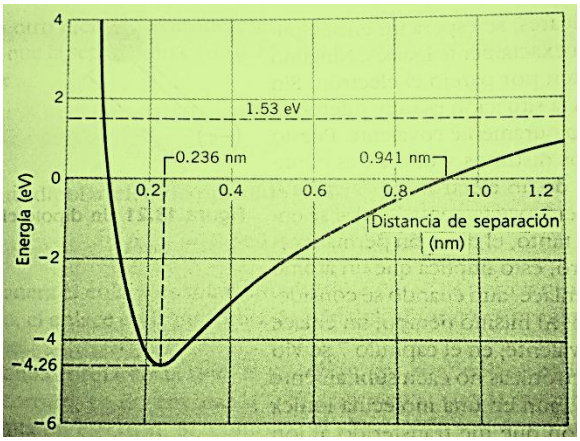


Figura VI.1.11: Energía de enlace iónico en el $NaCl$.

Hasta aquí se ha considerado la molécula de cloruro de sodio como una molécula aislada presente en un gas de $NaCl$. El espaciamiento entre los átomos en un sólido puede ser muy distinto al de una molécula.

¿Iónico o covalente?: El que se establezca un enlace covalente o iónico depende de la facilidad de los átomos para ceder sus electrones de valencia o, equivalentemente, el grado de dominio de un átomo sobre otro en su susceptibilidad para poseer todos los electrones de valencia. Para las moléculas diatómicas homonucleares se espera un enlace puramente covalente, ya que todos los átomos son exactamente iguales. Para las moléculas heteronucleares, los enlaces no serán "puramente" iónicos o covalentes, puesto que los átomos tienen números atómicos distintos y diferentes configuraciones electrónicas. Para calcular el grado relativo de ionicidad o covalencia se puede determinar si un átomo tiene, en promedio más carga negativa que el otro, midiendo el *momento dipolar eléctrico* de la molécula: $p = qr$. En una molécula puramente covalente el momento dipolar es cero.

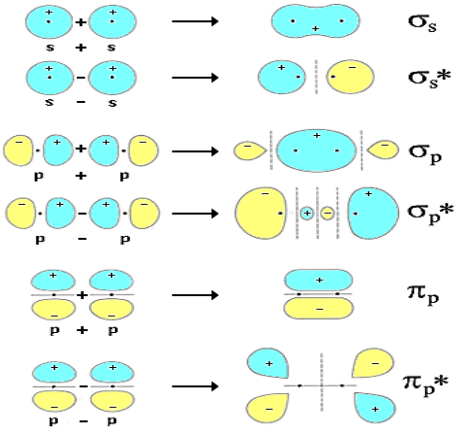


Figura VI.1.12: Algunos enlaces covalentes.

Ejemplo VI.1.1: Se calcula el momento dipolar eléctrico de la molécula de cloruro de sodio:

Solución: En cloruro de sodio la separación de equilibrio es de 2.36 Å,

Entonces: $p = qr = e \times 2.36\ \text{Å} = (1.60 \times 10^{-19}\ C) \times (2.36 \times 10^{-10}\ m) = 3.78 \times 10^{-29}\ C \cdot m$ ■

El momento dipolar medido para el $NaCl$ es $p_{med} = 3.0 \times 10^{-29}\ C \cdot m$; de modo que el porcentaje de ionicidad es $p_{med/p} = 79\ \%$. Si el $NaCl$ fuese una molécula iónica pura el momento dipolar sería igual al calculado.

Ejemplo VI.1.2: Se calcula el momento dipolar eléctrico de la molécula de HCl dado que la separación de equilibrio es de 1.28 Å, determinar si el enlace es covalente o iónico considerando que el momento dipolar eléctrico medido es $p_{med} = 0.360 \times 10^{-29}\ C \cdot m$:

Solución: $p = qr = e \times 1.28\ \text{Å} = (1.60 \times 10^{-19}\ C) \times (1.28 \times 10^{-10}\ m) = 2.05 \times 10^{-29}\ C \cdot m$,

Así que el enlace es $p_{med/p} = 0.360/2.05 = 18\%$ iónico. Por lo tanto, el enlace en la molécula de ácido clorhídrico es principalmente covalente. ■

Otros tipos de enlace:

Los sólidos existen debido a la existencia de materiales que soportan las fuerzas tangenciales (esfuerzos cortantes).

La fuerza entre átomos es tal que, a largo alcance es atractiva, aumenta como $1/r^6$ que corresponde a la polarización molecular y a corto alcance es repulsiva y decae como $1/r^{12}$ por el traslape de la nube electrónica. Esto se puede expresar mediante el potencial de Lennard-Jones:

$$V(r) = 4\epsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$$

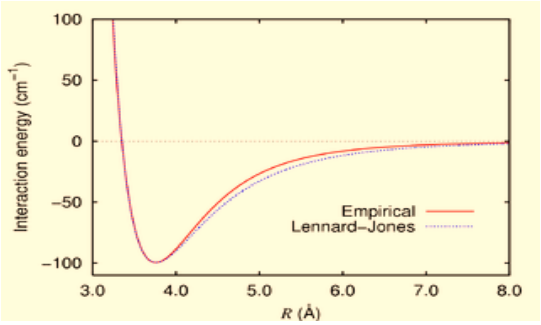


Figura VI.1.13: Potencial de Lennard-Jones.

Entonces, según lo anterior, existe una posición de equilibrio, que es la que mantiene la cohesión molecular en los materiales sólidos; esta posición de equilibrio es la que permite la existencia de los enlaces atómicos:

Iónico: En este tipo, un átomo cede uno o más electrones a otro átomo, de modo tal que uno de los átomos llena su última capa, la de valencia $(1-7, 2-8)$.

Covalente: Es típico de los átomos de la *columna IV* de la tabla periódica de los elementos. Así el Silicio, el Carbono, etc., son considerados materiales covalentes. El diamante es una estructura cristalina de carbono caracterizada (entre otras cosas) por este tipo de enlaces; y es el material más duro de todos los conocidos.

Metálico: Se verifica en la última capa (s), los materiales que lo presentan se caracterizan por tener una estructura compacta, con una elevada densidad. Los electrones forman una especie de pegamento o un *fluido de electrones* que recorre el material libremente constituyendo así un enlace comunitario.

Polar: Permite la interacción atómica mediante la redistribución de las nubes electrónicas. Los materiales polarizados están en la *columna III* de la tabla periódica de los elementos. En la *columna V* se encuentran los elementos que presentan enlaces "covalentes polarizados", este es el caso del arsenio de galio.

De Vander Walls: Actúan entre los planos atómicos del material interactuando polarmente; es un enlace débil.

Puente de Hidrógeno: Se presenta en el hielo y en el agua; así como en muchos compuestos orgánicos (CHON).

VI.2 ESPECTROS MOLECULARES (MOLÉCULAS DIATÓMICAS):

Una molécula puede absorber o emitir energía electromagnética tal como lo hace un átomo. La absorción o emisión de un fotón óptico cambia el estado de movimiento en una molécula, haciendo vibrar a los átomos unos con respecto a otros o haciéndolos girar con respecto al centro de masa. Los movimientos vibracionales y rotacionales están cuantizados y dependen de la masa del objeto que vibra o rota; y como los electrones tienen una masa muy pequeña dentro de una molécula como para que sea significativa, se pueden ignorar en cuanto a lo que se refiere a las absorciones o emisiones de energía molecular.

Espectros de vibración:

Energía de los niveles energéticos: Considérese (por simplicidad y sin pérdida de generalidad) una molécula diatómica, que vibra con oscilaciones armónicas sujetas a un potencial $V = kx^2/2$. Entonces, los niveles de energía vibracional están dados por:

$$E = h\nu\left(n + \frac{1}{2}\right); \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad \textbf{[VI.2.1]}$$

Donde ν es la misma frecuencia clásica de un oscilador $\nu = (1/2\pi)\sqrt{k/m}$. Puesto que los dos átomos de masas m_1 y m_2 de la molécula participan en la vibración, para determinar la masa que hay que usar en la ecuación anterior se considera que la energía total de la molécula es de:

$$E_T = \frac{m_1 v_1^2}{2} + \frac{m_2 v_2^2}{2} = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} \qquad \textbf{[VI.2.2]}$$

Con el centro de masa fijo (debido a que no hay movimiento traslacional de la molécula), $p_1 = p_2 = p$:

$$E_T = \frac{p^2}{2}\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) = \frac{p^2}{2}\left(\frac{m_1+m_2}{m_1 m_2}\right) = \frac{p^2}{2m}; \quad m = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}\right) \qquad \textbf{[VI.2.3]}$$

Esto es, la energía del sistema es la misma que la de una sola masa m que se mueve con un impulso p. La masa m es la masa efectiva de toda la molécula y se le conoce como *masa reducida* y es la masa que se debe usar al calcular la frecuencia vibratoria.

Nótese que $m = m_1/2$ cuando $m_1 = m_2$, como en una molécula homonuclear, la masa efectiva es la mitad de la masa de un átomo individual. Cuando una masa es mucho más grande que la otra, la masa reducida tiene un valor casi igual a la masa más ligera, ya que la inercia de la masa más pesada reduce su tendencia moverse y la mayor parte del movimiento vibratorio lo realiza la masa más ligera.

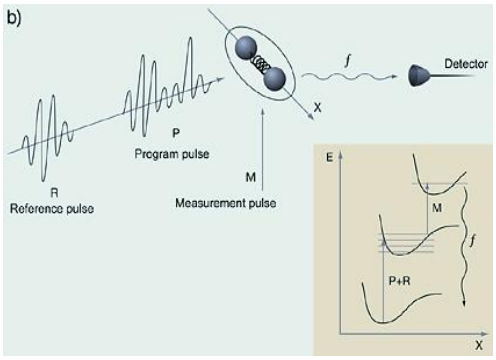


Figura VI.2.1: Medición vibracional.

Para calcular la contante k se considera, el potencial $V = kx^2/2$ como primera aproximación de la energía de la molécula en la región cercana a la posición de equilibrio, que bien se puede ajustar con una parábola de la forma:

$$E - E_0 = k(R - R_0)^2/2$$

La parábola se aproxima a la energía molecular verdadera en la vecindad del mínimo. La constante k se puede estimar como:

$$k = \frac{2(E - E_0)}{(R - R_0)^2}$$

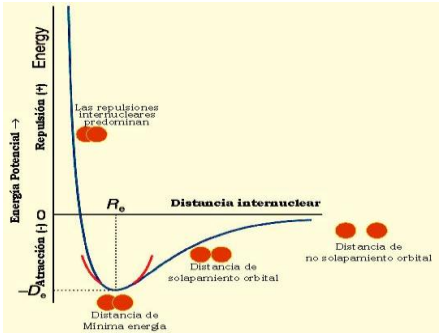


Figura VI.2.2: Energía potencial vibracional.

El intervalo típico para longitudes de onda de las vibraciones moleculares va desde 1 hasta 100 μm, es decir que se encuentra en la región del infrarrojo.

Transiciones permitidas: Los estados excitados del oscilador armónico están dados por $E = h\nu(N + 1/2)$. Si se excitara una molécula de su estado base vibratorio a un estado de excitación, regresaría al estado base emitiendo uno o más fotones correspondientes a las transiciones entre los distintos niveles de vibración. Estas transiciones se encuentran sujetas a la regla de selección:

$$|\Delta N| = 1$$

Así que, solo pueden ocurrir las transiciones que cambian el número cuántico vibracional "N" una unidad. Por lo tanto, todas las transiciones tienen exactamente la misma energía $h\nu$.

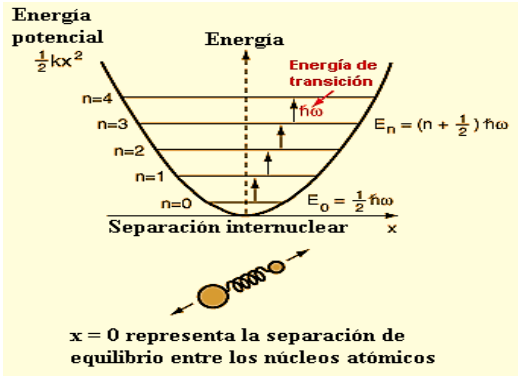


Figura VI.2.3: Regla de selección vibracional.

Por supuesto, a medida que se alcanzan niveles de excitación elevados $N \geq 5$, por ejemplo, el oscilador armónico ya no describe con precisión el movimiento vibratorio; las transiciones ya no tendrán la misma energía y ΔN puede ser diferente de 1.

Espectros de rotación:

Energía de los niveles energéticos: Una segunda forma en que una molécula puede cambiar su estado de movimiento cuando absorbe o emite radiación es girando alrededor de su centro de masa.

Considérese la molécula que se muestra en la figura. El sistema de coordenadas tiene como origen el centro de masa de la molécula; así, $x_1 m_1 = x_2 m_2$. La energía cinética rotacional es:

$$K = \frac{1}{2} I \omega^2$$

Donde $I = m_1 x_1^2 + m_2 x_2^2$ es el momento de inercia de la molécula y ω es la velocidad angular.

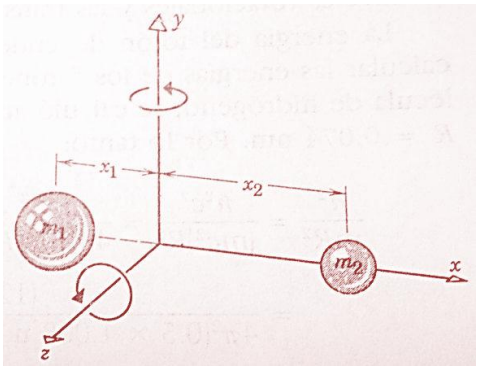


Figura VI.2.4: Rotación molecular.

También se puede expresar la energía cinética en términos del impulso angular $|\boldsymbol{L}| = I\omega$:

$$K = \frac{|\boldsymbol{L}|^2}{2I} \qquad \textbf{[VI.2.4]}$$

Lo cual se puede expresar en función de la masa reducida $m = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ y de la separación de equilibrio $R = x_1 + x_2$ como:

$$I = mR^2 \qquad \textbf{[VI.2.5]}$$

La energía cinética se toma como la energía total del sistema que debe estar cuantizado, ya que no hay energía potencial. Se puede anticipar el valor de las energías cuantizadas. Para el átomo de hidrógeno, el impulso angular $\boldsymbol{L}$ tiene una magnitud dada por $|\boldsymbol{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)}$; donde $L = 0, 1, 2, 3, \ldots$ y se espera, por lo tanto que las energías de la molécula diatómica en rotación sean:

$$E = \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mR^2} \qquad \textbf{[VI.2.6]}$$

Transiciones permitidas: A medida que la molécula se excita a un estado de rotación alto, decae al estado base emitiendo fotones correspondientes a las transiciones de rotación. La regla de selección para estos fotones es:

$$|\Delta L| = 1 \qquad \textbf{[VI.2.7]}$$

Entonces, la energía de un fotón será, como siempre, la diferencia de energía entre dos niveles adyacentes:

$$\Delta E = E_{L+1} - E_L = \frac{\hbar^2(L+1)(L+2)}{2mR^2} - \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mR^2} = (L+1)\frac{\hbar^2}{mR^2} \qquad \textbf{[VI.2.8]}$$

Ejemplo VI.2.1: Calcular los niveles energéticos de rotación en la molécula de H_2 y las longitudes de onda correspondientes:

Solución: Para la molécula de hidrógeno, se tiene que $m \approx 0.5 \times 1.008\, u$ y $R = 0.74$ Å;

Entonces, $\hbar^2/mR^2 = 0.0152\, eV$. Así que las transiciones rotacionales permitidas tienen las siguientes energías y longitudes de onda:

$L = 1$ a $L = 0$	$\Delta E = 0.0152\, eV$	$\lambda = 81.6\, \mu m$
$L = 2$ a $L = 1$	$\Delta E = 0.0304\, eV$	$\lambda = 40.8\, \mu m$
$L = 3$ a $L = 2$	$\Delta E = 0.0456\, eV$	$\lambda = 27.2\, \mu m$

Las energías forman una sucesión: ΔE, $2\Delta E$, $3\Delta E$, …; y las longitudes de onda emitidas son: λ, $\lambda/2$, $\lambda/3$, … y se encuentran en la región del *infrarrojo lejano*. ■

Ejemplo VI.2.2: Calcular los niveles energéticos de rotación en la molécula de $NaCl$ y las longitudes de onda correspondientes:

Solución: Para la molécula de cloruro de sodio, $\hbar^2/mR^2 = 53.6 \times 10^{-6}\ eV$. Así que las transiciones rotacionales permitidas tienen las siguientes energías y longitudes de onda:

$$L = 1 \text{ a } L = 0 \qquad \Delta E = 53.6 \times 10^{-6}\ eV \qquad \lambda = 23.1\ mm$$
$$L = 2 \text{ a } L = 1 \qquad \Delta E = 107.2 \times 10^{-6}\ eV \qquad \lambda = 11.6\ mm$$
$$L = 3 \text{ a } L = 2 \qquad \Delta E = 160.8 \times 10^{-6}\ eV \qquad \lambda = 7.71\ mm$$

Las transiciones se encuentran en la región de las microondas. ■

Espectros combinados de vibración-rotación:

Al suministrar energía a una molécula, no es posible controlar directamente la proporción de energía que va a las rotaciones y la cantidad que se consume en las vibraciones. De hecho, se darán los dos tipos de movimiento. Aún más, no se puede observar una sucesión de emisiones puramente rotacionales o vibracionales. Puesto que las energías rotacionales son mucho más pequeñas que las de vibración, los estados excitados moleculares se pueden representar con una sucesión de niveles vibracionales, en que cada nivel vibracional sirve como base para una sucesión de estados rotacionales. Los estados deben identificarse tanto con el número cuántico vibracional N como con el número cuántico rotacional L.

Transiciones permitidas: Considérese el estado con números cuánticos N y L. La transición al siguiente estado rotacional más bajo con los números cuánticos N y $L-1$, no puede realizarse ya que se violaría la regla de selección $|\Delta N| = 1$ para la parte vibracional del movimiento de la molécula.

Todas las transiciones moleculares deben satisfacer las ambas reglas de selección: $|\Delta N| = 1$ y $|\Delta L| = 1$ al mismo tiempo.

El estado vibracional y rotacional con números cuánticos N y L puede realizar una transición al estado $N-1$ y $L-1$ o $N-1$ y $L+1$, esto explica porque no se observa la sucesión de transiciones rotacionales $L \to L-1 \to L-2$, para un número cuántico N dado. En la figura, las transiciones marcada con una × violan las reglas de selección y no son permitidas.

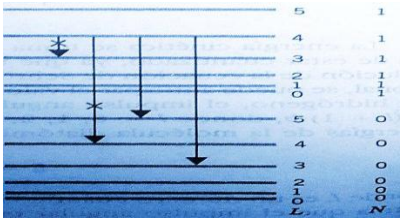


Figura VI.2.5: Selección combinada.

Energía de los niveles energéticos: Se considera el estado con números cuánticos N y L, su energía se puede expresar como la suma de los términos rotacionales y vibracionales:

$$E = E = h\nu\left(N + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mR^2} \qquad \text{[VI.2.9]}$$

Debido a que el término vibracional es mucho más grande que el rotacional, las longitudes de onda de emisión corresponderán generalmente a las transiciones $N \to N-1$, mientras que $L \to L \pm 1$. Las longitudes de onda de absorción serán aquellas para las que $N \to N+1$.

Interpretación de espectros: Así como la espectroscopia atómica proporciona una técnica para identificar los átomos por sus emisiones o absorciones características, la *espectroscopia molecular* permite identificar las moléculas por la radiación que absorben o emiten, de modo que se pueden identificar el número de átomos de cada tipo, las razones isotópicas y hasta el estado de ionización de la molécula.

Ejemplo VI.2.3: Calcular las energía de un fotón de emisión molecular $N \to N-1$, $L \to L \pm 1$:

Solución: Un fotón correspondiente a la transición $N \to N-1$, $L \to L \pm 1$ tendrá la energía:

$$\Delta E = E_{N,L} - E_{N-1,L\pm1} = \left[h\nu\left(N+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mR^2}\right] - \left[h\nu\left(N-\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2(L\pm1)(L\pm1+1)}{2mR^2}\right]$$

$$= h\nu + \frac{\hbar^2(-L-1)}{mR^2}; \quad \text{cuando } L \to L+1,$$

$$= h\nu + \frac{\hbar^2 L}{mR^2}; \quad \text{cuando } L \to L-1$$

Así se tienen las dos series:

$$h\nu - \hbar^2/mR^2,\ h\nu - 2\hbar^2/mR^2,\ h\nu - 3\hbar^2/mR^2,\ \ldots \text{ para } L \to L+1$$

$$h\nu + \hbar^2/mR^2,\ h\nu + 2\hbar^2/mR^2,\ h\nu + 3\hbar^2/mR^2,\ \ldots \text{ para } L \to L-1$$

En las series no aparecen los términos para $L = 0$ si $L \to L-1$, ni tampoco las transiciones vibracionales puras con $\Delta L = 0$ ya que son prohibidas. ■

Interpretación de una distribución: Las transiciones en el espectro de absorción (emisión) de una molécula, como la del HCl, de la figura, no se encuentran igualmente espaciadas ya que la aproximación parabólica para la parte vibracional solo se cumple para los primeros estados de excitación. Adicionalmente, se tiene que las alturas de los picos son muy diferentes dado que son proporcionales a las poblaciones de cada nivel particular, los niveles rotacionales tienen una degeneración $2L+1$, de modo que a medida que aumenta el valor de L, la población de estados decrece. Los picos dobles deben a los isótopos $H^{35}Cl$ y $H^{37}Cl$ presentes en la muestra.

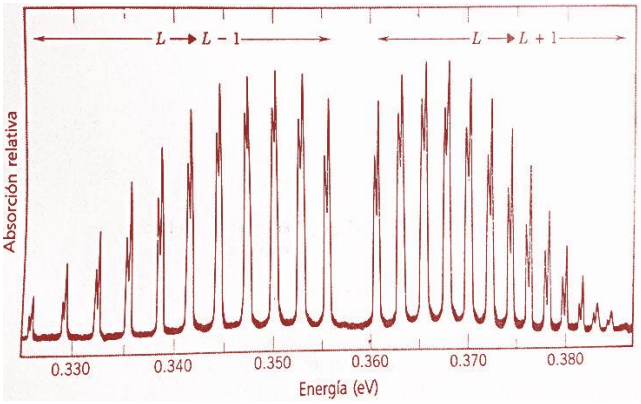


Figura VI.2.5: Espectro de absorción del ácido clorhídrico.

Efecto RAMAN:

Cuando una estructura poliatómica se ilumina por un rayo láser (radiación monocromática del espectro visible), se observan varios fenómenos: la reflexión de luz, absorción, transmisión y dispersión de fotones. Se distinguen la dispersión elástica de fotones (dispersión Rayleigh) y la inelástica (Raman). En el proceso de dispersión elástica, los fotones esparcidos tienen la misma energía que los fotones incidentes. En el caso de dispersión inelástica, los fotones esparcidos obtienen una energía adicional gracias al intercambio energético entre los fotones incidentes y los niveles excitados de energía de la estructura poliatómica.

Por de la acción de los fotones incidentes, que tienen una energía $h\nu$ más alta que la del estado vibracional de la estructura poliatómica, el material irradiado obtiene temporalmente un nivel inestable y después vuelve a uno de los estados permitidos, emitiendo un fotón de energía más alta que los fotones iniciales.

La dispersión elástica es el proceso dominante, mientras que la dispersión Raman afecta solo 10^{-3} de todos los fotones esparcidos. La diferencia de energía entre los fotones incidentes y los esparcidos es una característica especial para cualquier material, tanto cristalino como amorfo.

Cuando un fotón incide sobre una molécula e interacciona con la nube de electrones de los enlaces de esa molécula. El fotón incidente excita la molécula a un *estado virtual*. En el efecto Raman espontáneo, la molécula es excitada desde el estado fundamental a un estado de energía virtual y se relaja desde el estado vibracional excitado, lo que genera la llamada *dispersión Raman Stokes*. Si la molécula ya estaba en un estado vibracional excitado, la dispersión Raman se denomina *dispersión Raman anti-Stokes*.

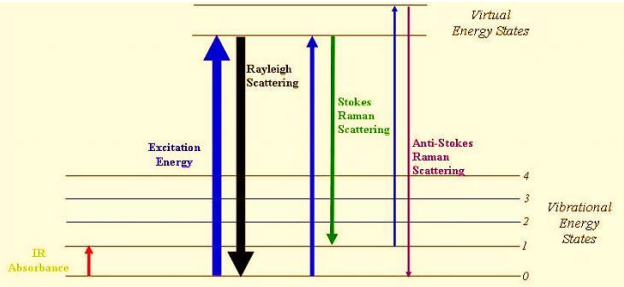


Figura VI.2.6: Efecto RAMAN.

El patrón de frecuencias de desplazamiento es determinado por los estados vibracionales y rotacionales típicos de la muestra bajo estudio. El espectro de Raman es normalmente expresado en número de ondas, que tiene unidades de longitud recíproca, para convertir entre longitud de onda del espectro y número de ondas de desplazamiento en el espectro Raman se utiliza la fórmula:

$$\Delta\omega = \left(\frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{\lambda_1}\right) \qquad \textbf{[VI.2.10]}$$

Donde $\Delta\omega$ es el desplazamiento de Raman expresado en número de ondas, λ_0 es la longitud de onda de excitación y λ_1 es la longitud de onda del espectro de Raman. Usualmente, las unidades elegidas para expresar el número de ondas en el espectro de Raman es el centímetro recíproco (cm^{-1}).

PROBLEMAS ILUSTRATIVOS

1. Se determina la expresión que permite calcularla velocidad del electrón en la órbita n-ésima de un átomo de un electrón con carga nuclear Ze (donde e es la carga del electrón), y se escribe en términos de Z, de la velocidad de la luz en el vacío y de la constante de la estructura fina:

⇒ Ya que, según el modelo clásico del átomo, la condición para la estabilidad de la órbita se puede escribir como:

$$F = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$

Y como $L = m_e vr = n\hbar;\ \ n \in \mathbb{N}$, ya que el momento angular está cuantizado (4° postulade donde Bohr).

⇒ se puede obtener que $r_n = 4\pi\varepsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{m_e Ze^2} = \frac{n^2 a_0}{Z}$; y como $m_e vr = n\hbar$, de donde $v = \frac{n\hbar}{m_e r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{n\hbar}$.

Ahora bien, la constante de estructura fina es: $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c 4\pi\varepsilon_0} = \frac{1}{137.0359}$, de modo que se puede escribir: $v = \frac{\alpha Z c}{n}$.

Lo que determina también el máximo valor de $Z \leq 137$ para un átomo de un electrón en la órbita $n = 1$ como un límite natural para que la velocidad de la órbita no sea mayor que la velocidad de la luz c, aunque en la tabla periódica no se tienen elementos conocidos con este valor de Z ■

2. Se marca con una C las afirmaciones correctas y con una F las falsas. Se explica el porqué.

a) **C** En la dispersión de un fotón por un electrón libre el cambio de longitud de onda del fotón es independiente de la longitud de onda del fotón incidente.

Argumento: Es correcta ya que: $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - cos\,\phi)$; $\lambda_c = \frac{h}{m_e c} = 0.024$ Å.

b) **F** La energía del primer estado excitado de un oscilador armónico simple mecánico-cuántico que tiene una energía E_0 en su estado básico vale $3E_0/2$ en el primer estado excitado.

Argumento: Es falsa ya que la energía del oscilador armónico simple mecánico-cuántico está dada por la expresión $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu;\ \ n = 0, 1, 2, 3, ...$; ⇒ en el estado base $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$, y en el primer estado excitado $E_1 = \left(1 + \frac{1}{2}\right)h\nu = \frac{3}{2}h\nu$, lo cual es $\neq \frac{3}{2}E_0 = \frac{3}{2}\left(\frac{1}{2}h\nu\right) = \frac{3}{4}h\nu$.

c) **F** La ley de Stefan-Boltzmann plantea que la densidad espectral de la energía (W/m^3) emitida por un cuerpo negro que se encuentra a la temperatura absoluta T es proporcional a la cuarta potencia de esta.

Argumento: La ley de Stefan-Boltzmann establece que: un cuerpo negro emite radiación térmica con una potencia emisiva superficial dada por: $R_T = \int_0^\infty R_T(\nu)d\nu = \int_0^\infty f(\lambda,T)d\lambda = \sigma T^4$, donde $\sigma = 5.67 \times 10^{-8}\ W/m^2K^4$; es decir que la potencia radiada tiene unidades $[W/m^2]$. La densidad espectral en cambio está definida por $\rho_T(\nu) = \frac{dR_T(\nu)}{d\nu} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\left[e^{h\nu/kT} - 1\right]^{-1}$ $[J \cdot s \cdot m^{-3}]$.

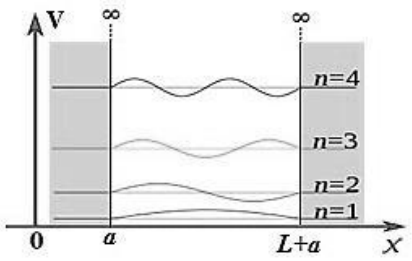
d) **F** El momento magnético orbital de un electrón en un estado p del átomo de H es igual a dos magnetones de Bohr, μ_B.

Argumento: La afirmación no es correcta. El momento magnético, $\mu = iA$, de un electrón en un átomo de hidrógeno es $\mu = -ev\pi r^2$, y como $L = mvr = m2\pi\nu r^2$ entonces $\mu = -\left(\frac{e}{2m}\right)\boldsymbol{L}$. También se puede escribir $\mu = -g_s\mu_B(s/\hbar)$; donde $g_s \approx 2$ (la teoría clásica predice que $g_s = 1$; pero un gran éxito de la ecuación de Dirac fue la predicción de que $g_s = 2$, que está muy cerca del valor exacto (que es ligeramente superior a dos; esta última corrección se debe a los efectos cuánticos del campo electromagnético). Así que $\mu = -2\mu_B(s/\hbar) \neq 2\mu_B = 2\left(\frac{e\hbar}{2m}\right) = \left(\frac{e\hbar}{m}\right)$.

f) **F** El número de fotones por segundo contenidos en $6.62\ W$ de radiación de frecuencia $10^{12}\ Hz$ es igual a 10^{32}.

Argumento: Para una frecuencia $\nu = 10^{12}\ Hz = 10^{12}\ s^{-1}$ se tiene una energía $E = h\nu = 6.625 \times 10^{-34}\ J \cdot s \times 10^{12}\ s^{-1}$, $\Rightarrow\ E = 6.625 \times 10^{-22}\ J$. Así que la energía transportada cada segundo por un fotón de esta frecuencia es $P = 6.625 \times 10^{-22}\ W$. De modo que el número de fotones contenidos en $6.62\ W$ es $6.62\ W/6.625 \times 10^{-22}\ W = 10^{22}$. Por lo tanto $N_{fotones} = 10^{22}$ y <u>no</u> 10^{32}.

3. a) La energía de una partícula confinada en un pozo de potencial infinito unidimensional está dada por:

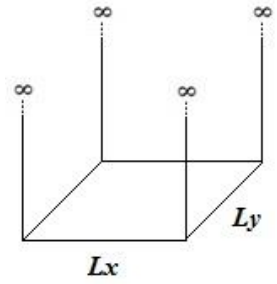


$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{2mL^2};\ \ n \in \mathbb{N} - \{0\}$$

Donde L es la longitud del pozo. ⇒ la expresión la energía necesaria para que la partícula transite del primer al cuarto estado excitado es:

$$E_4 - E_1 = \Delta E_{4-1} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(5^2 - 2^2) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(21).$$

b) Para una partícula confinada en un pozo de potencial bidimensional cuadrado la expresión para la energía es:



$E_{n_x,n_y} = \frac{\pi\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$ y si $L_x = L_x\ \Rightarrow E_{n_x,n_y} = \frac{\pi\hbar^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2\right)$.

⇒ el cuarto estado excitado es $E_{5,5}$, y el primer estado excitado $E_{2,2}$ de modo que $E_{4,4} - E_{1,1} = \frac{\pi\hbar^2}{2mL^2}\left[\left(5^2 + 5^2\right) - \left(2^2 + 2^2\right)\right]$

$= \frac{\pi\hbar^2}{2mL^2}[(2 \times 25) - (2 \times 4)] = \frac{\pi\hbar^2}{2mL^2}[50 - 8] = \frac{\pi\hbar^2}{2mL^2}(42).$

Nota: se ha tomado $n_x = n_y$. Las componentes de la función de onda, en los estados excitados, pueden tener valores diferentes o iguales (degeneración) para una misma energía. ■

4. Cuando un átomo se coloca en presencia de un campo magnético de inducción B, cada nivel energético se separa en dos subniveles a causa del espín electrónico.

El aumento (o disminución) en la energía de un nivel concreto depende de los números cuánticos S, L, J y M_J de ese nivel. Si se considera un campo magnético B paralelo a la dirección espacial Z, se obteniene que la variación de energía correspondiente a un estado propio de estructura fina está dada por: $\Delta E = \mu_B B g M_J$; Donde μ_B es el magnetón de Bohr y g es el factor de Landé. El factor de Landé viene dado por la expresión:

$g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}$, que para este caso se puede escribir como: $g = \frac{3}{2} + \frac{\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)-0(0+1)}{2\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)} = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} = 2$.

Así también, el impulso angular total J queda relacionado con el momento magnético M_J según la ecuación:

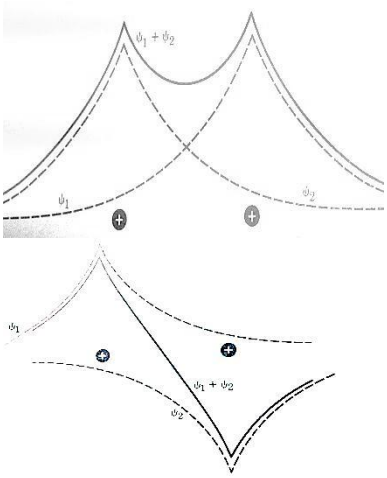
$M_J = -g\frac{\mu_B}{\hbar}\cdot J$; así que, podemos escribir: $\Delta E = \mu_B B g M_J = \mu_B B g\left(-g\frac{\mu_B}{\hbar}\cdot J\right) = -\frac{\mu_B^2 B g^2}{\hbar}\cdot J = -\frac{\mu_B^2 B 2^2}{\hbar}\cdot\frac{1}{2}$

$\therefore \quad \Delta E = -\frac{2\mu_B^2 B}{\hbar}$. ■

5. Se explica porque la energía de disociación del ión molecular de hidrógeno es de $2.7\ eV$:

El ion molecular de hidrógeno H_2^+ se obtiene al sacar un electrón de la molécula de hidrógeno H_2, de modo que el electrón restante está compartido por los dos iones girando alrededor de ellos. El electrón permanece la mayor parte del tiempo entre ambos protones, de esa manera atrae a cada protón y la molécula se liga, ya que la fuerza de atracción $2e^2/4\pi\epsilon_0(R/2)^2$ es mayor que la repulsiva $e^2/4\pi\epsilon_0 R^2$.

También se puede ver este proceso como una superposición coherente de las dos ondas electrónicas de los dos átomos distintos.



Orbital molecular de enlace. Orbital anti enlazante.

Al sumar las funciones de onda, pueden tener el mismo signo o signos opuestos, lo cual tiene un efecto apreciable sobre la distribución dada por ψ^2. En el primer caso el electrón tiene una probabilidad grande de encontrarse en la región entre los dos protones; en el otro, tiene una probabilidad pequeña de encontrarse ahí. Solo en el primer caso es cuando se espera que se forme la ligadura.

Cuando los dos protones se encuentran muy separados la energía del electrón es $-13.6\ eV$ y la energía de repulsión de Coulomb V_p entre los protones es muy pequeña y se puede despreciar. A medida que los protones se acercan V_p aumenta y la energía del electrón disminuye ya que siente una fuerza neta más grande y su función de onda se aproxima a la de un átomo con $Z = 2$. Cuando las funciones de onda tienen el mismo signo, ψ tiene un máximo en $R \to 0$ y que corresponderá al estado $1s$ el átomo con $Z = 2$. Así que, como $E_n = (-13.6\ eV)Z^2/n^2$ para los átomos hidrogenoides, su energía será $E_+ = -54\ eV$. Así pues, $V_p + E_+$ tiene un mínimo en $R = 1.06\ \text{Å} \cong 2a_0$ y una energía de ligadura $E_{total}(R=\infty) - E_{total}\left(R = 1.06\ \text{Å}\right) = 2.7\ eV$.

PROBLEMAS RESUELTOS DE PRUEBA

1. Suponga que una bola de billar ($m = 100\ g$) está confinada en una mesa de ancho igual a $1\ m$ y largo igual a $2\ m$. (En los bordes de la mesa hay paredes que pueden considerarse infinitamente altas) A) Calcule el valor de la mínima velocidad de la bola de billar al que conduciría la mecánica cuántica y el tiempo que demoraría la bola en recorrer una distancia igual al radio de un núcleo de Oro ($A = 100$)? B) ¿Qué energía se requerirá para que la bola pase del estado de mínima velocidad al primer estado excitado?

2. La energía de las líneas de rayos X característicos K_α (transición $n = 2 \rightarrow n = 1$) y K_β ($n = 3 \rightarrow n = 1$) emitidos por la plata ($Z = 47$) son 21.990 y $25.145\ keV$. Calcule: A) La energía de los rayos X de la línea L_α ($n = 3 \rightarrow n = 2$). B) Determine la energía de los RX de la línea K_α del sodio ($Z = 11$).

3. La energía de una molécula diatómica puede aproximarse según la expresión: $E(r) = A/r^n - B/r^m$, donde A y B son constantes. El primer término representa la repulsión entre los átomos que forman la molécula y el segundo la atracción entre ellos. Los números n y m son enteros. A) Haga un gráfico de la forma de la función $E(r)$ y señale en él la distancia de equilibrio molecular. B) Escriba la ecuación que permite calcular la energía a la distancia de equilibrio de los átomos. C) Demuestre que solamente se tendrá un enlace estable cuando $m < n$. D) ¿Cómo calcularía la energía de los niveles vibracionales de la molécula si la masa de los átomos es m y la constante elástica K? Dibuje la región aproximada del gráfico del inciso A donde se cumple la fórmula escrita y diga por qué. E) ¿Cómo determinaría el valor de la constante K a partir del gráfico del inciso A?

Respuestas

1. A) Como suposiciones adicionales, debemos considerar la que bola de billar no pierde energía al chocar contra las paredes de la mesa. También podemos hacer el tratamiento unidimensional, es decir en una sola dirección, digamos X, y suponer que su movimiento en la otra dirección perpendicular, Y, es independiente; desde luego, su recorrido por toda la superficie de la mesa la suma de ambas soluciones.

Según la mecánica cuántica una partícula confinada en un pozo cuadrado o rectangular de paredes infinitas tendrá el siguiente tratamiento:

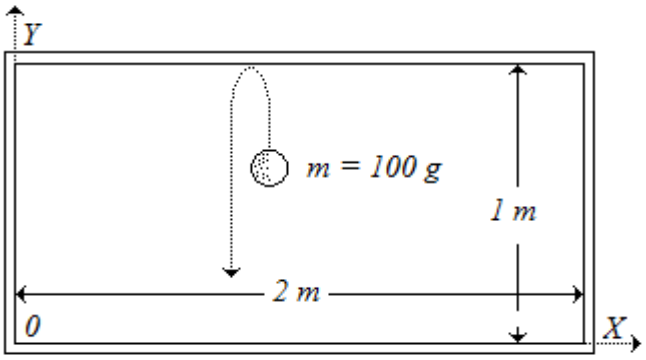
Inicialmente, considérese el movimiento de la bola restringido a la dirección X, entre $x = 0$ y $x = 2\ m = L$ por paredes infinitamente duras, como no pierde energía en el choque contra las paredes, su energía total se mantendrá constante. La energía potencial V, afuera de la mesa será infinita y en la mesa será constante, por conveniencia hacemos $V = 0$. Como la bola no posee una energía infinita no puede estar fuera de la mesa, así que su función de onda $\psi = 0$ para $x \leq 0$ y $x \geq L$. Para resolver el problema debemos encontrar el valor de ψ dentro de la mesa, es decir, entre $x = 0$ y $x = L$.

Dentro de la mesa se puede escribir la ecuación de Schrödinger como:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) = 0.$$

Esta ecuación tiene la solución general:

$$\psi(x) = A \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right) + B \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right)$$



Donde A y B son dos constantes por determinar. La solución está sujeta a las condiciones de frontera que exigen se cumpla que $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Como $\sin 0 = 0$, se requiere que $B = 0$, ya que el coseno no se anula en cero.

Así que con la primera condición de frontera la solución se reduce a: $\psi(x) = A \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right)$.

Para que esta solución sea cero en $x = L$, se requiere que: $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}L = n\pi;\ n \in \mathbb{N}$.

De lo anterior se ve que la energía de la bola solo puede tener los valores: $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2},\ n \in \mathbb{N}$.

El número n cuántico define el nivel de energía E_n, de la bola de billar en cuanto a su desplazamiento en la dirección X. Para el caso del desplazamiento en la dirección Y, entre $y = 0$ y $y = 1\,m = R$, la solución será exactamente igual, solo sustituimos L por R, de modo que la energía total de la bola de billar en la mesa será la suma de ambas energías:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mR^2} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{L^2} + \frac{1}{R^2}\right), \quad n \in \mathbb{N}.$$

Ahora bien, si consideramos que la energía de la bola es puramente cinética; es decir, $E_T = \frac{mv^2}{2}$, para el nivel de energía $n = 1$ se tendrá que:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mR^2}$$

Así que la velocidad de la bola es: $v = \sqrt{\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{m^2L^2} + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{m^2R^2}} = \frac{n\pi\hbar}{m}\sqrt{\frac{1}{L^2} + \frac{1}{R^2}}$.

El valor de la mínima velocidad de la bola de billar estará dado para $n = 1$:

$$v = \frac{\pi\hbar}{m}\sqrt{\frac{1}{L^2} + \frac{1}{R^2}} = \frac{\pi\left(1.054571628\cdot 10^{-34} J\cdot s\right)}{0.1kg}\sqrt{\frac{1}{(2m)^2} + \frac{1}{(1m)^2}} = 3.7040851 \cdot 10^{-33} m/s.$$

El tiempo que tarda la bola en recorrer una distancia igual al radio de un núcleo de oro (Au^{79}), si suponemos que es de 1.74 Å, estaría dado por: $t = \frac{d}{v} = 1.74 \cdot 10^{-10} m / 3.7040851 \cdot 10^{-33} m/s = 4.697516 \cdot 10^{22} s$.

Donde hemos tomado como radio del oro (Au^{79}) el radio calculado de $1.74 \cdot 10^{-10} m$.

1. B) La energía que se requerirá para que la bola pase del estado de mínima velocidad al primer estado excitado, está dada por:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{2^2\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{L^2}+\frac{1}{R^2}\right) - \frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{L^2}+\frac{1}{R^2}\right) = (4-1)\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{L^2}+\frac{1}{R^2}\right) = 3E_1. \quad \blacksquare$$

2. A) Se calcula la energía de los rayos X de la línea L_α ($n = 3 \rightarrow n = 2$):

Moseley dio dos fórmulas para las líneas K_α y L_α, en su notación original al estilo de Rydberg, estás son:

$$\nu(K_\alpha) = \frac{3}{4}(3.29\cdot 10^{15})\cdot(z-1)^2 Hz, \qquad \text{y} \qquad \nu(L_\alpha) = \frac{5}{36}(3.29\cdot 10^{15})\cdot(z-7.4)^2 Hz.$$

De esta última obtenemos: $\nu(L_\alpha)_{Ag} = \frac{5}{36}(3.29\cdot 10^{15})\cdot(47-7.4)^2 Hz = 716.561993\cdot 10^{15}\ Hz$

$$E(L_\alpha)_{Ag} = h\nu = (4.13566733\cdot 10^{-15} eV)\cdot(716.561993\cdot 10^{15}\ Hz) = 2.963\ keV.$$

En caso de que no nos recordemos de esta fórmula podemos aproximar la energía de la transición L_α tomando la diferencia de energías:

$$E(L_\alpha)_{Ag} \approx \left|E(K_\alpha)_{Ag} - E\left(K_\beta\right)_{Ag}\right| = |21.99 - 25.145|\ keV = 3.155\ keV.$$

Que tiene un error de menos del 7%.

2. B): Se determina la energía de los rayos X de la línea K_α del sodio ($Z = 11$):

Para ello consideramos la ley de Moseley, que establece para la línea K_α, que el hueco que queda en la capa K se llena con un electrón de la capa $L(n = 2)$. Pero un electrón de la capa L ve parcialmente apantallado al núcleo por el electrón restante de la capa K, por lo que ve una carga nuclear de $Z - 1$. Entonces, la energía del fotón K_α puede aproximarse como una transición de $n = 2$ hasta $n = 1$ en un átomo con un electrón cuya carga nuclear efectiva es $Z - 1$.

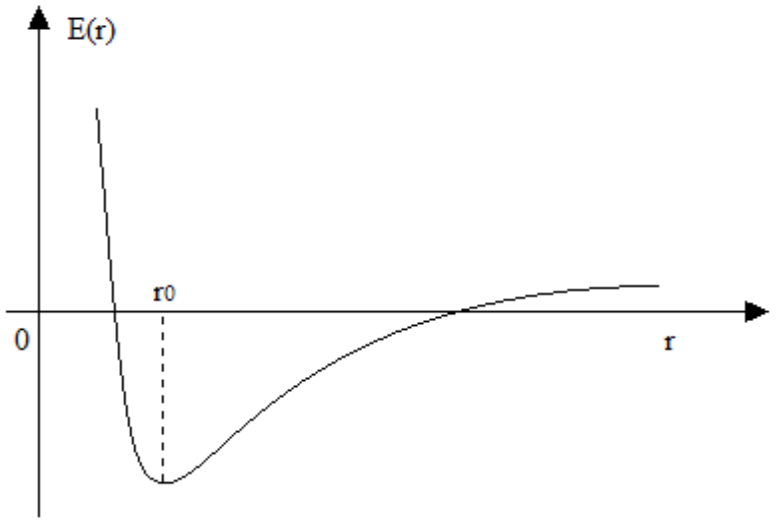
La ley de Moseley, para la energía de estas transiciones es: $E = h\nu = \frac{m_e q_e^4 (z-1)^2}{8h^2\epsilon_0^2}\left(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{2^2}\right)$,

Entonces, $E(K_\alpha)_{Na} = \left(\frac{3}{4}\right)\frac{m_e q_e^4 (11-1)^2}{8h^2\epsilon_0^2} = 1.0256\ keV.$ $\blacksquare$

3. A) Se hace un gráfico de la forma de la función $E(r) = A/r^n - B/r^m$, para una molécula diatómica y se señala señale en él la distancia de equilibrio molecular:

La energía potencial $E(r)$ de una molécula debida a las fuerzas intermoleculares es una función de *r*, y conocida como potencial de Lennard-Jones.

La energía potencial es máxima en los dos puntos más alejados del equilibrio donde $E(r) = 0$, y es mínima en la posición de equilibrio, $r = r_0$. Lo contrario le ocurre a la energía cinética que es cero en los dos puntos más alejados del origen y es máxima en $r = r_0$.



3. B) Se escribe la ecuación que permite calcular la energía a la distancia de equilibrio de los átomos:

Esta función es la derivada de $E(r)$, evaluada en el punto donde se hace cero; es decir, donde se encuentra el mínimo.

Por tanto se tiene: $E(r) = A/r^n - B/r^m \implies E'(r) = -\frac{nA}{r^{n-1}} + \frac{mB}{r^{m-1}} = 0$, de donde: $\frac{nA}{r^{n-1}} = \frac{mB}{r^{m-1}}$.

Así que: $r = \sqrt[n-m]{\frac{nA}{mB}} = r_0$, $\quad \therefore \quad E(r_0) = A\sqrt[m]{\frac{nA}{mB}} - \frac{B}{\sqrt[n]{\frac{nA}{mB}}}$ es una ecuación que permite calcular la energía en el punto de equilibrio.

3. C) Se demuestra que solamente se tendrá un enlace estable cuando $m < n$.

Entonces, de la ecuación: $E(r) = \frac{A}{r^n} - \frac{B}{r^m} = \frac{Ar^m - Br^n}{r^{n+m}}$, si $m < n$.

Dependiendo de los valores de A y B, en principio, $r^m < r^n$. Así que $E(r) < 0$, lo cual establece un estado ligado y la posibilidad de que el sistema molecular sea estable teniendo un pozo de potencial con un mínimo. De otro modo, el sistema tendría un potencial positivo y no habría un punto de mínima energía, por lo que el sistema no sería estable.

3. D) Se calcula la energía de los niveles vibracionales de la molécula si la masa de los átomos es m y la constante elástica K.

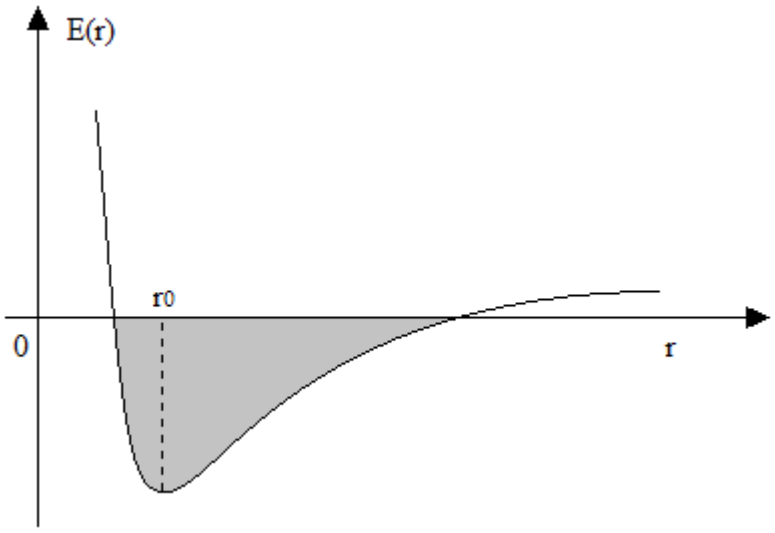
Para ello podemos utilizar la ecuación: $E_{vib} = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\omega_0$, $n = 0, 1, 2, \ldots$

Dónde: $\omega_0 = \sqrt{K\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)} = \sqrt{K\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{m}\right)} = \sqrt{\frac{2K}{m}}$ nos da la frecuencia angular en la aproximación de movimiento armónico simple.

∴ Los niveles vibracionales son: : $E_{vib} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\sqrt{\frac{2Kh^2}{m}}$.

Se dibuje la región aproximada del gráfico del inciso A donde se cumple la fórmula escrita:

Como la energía potencial es máxima en los dos puntos más alejados del equilibrio donde $E(r) = 0$, ahí la energía cinética se anula. En la posición de equilibrio, $r = r_0$, la energía potencial es mínima pero la cinética es máxima; por eso, es en esa zona donde se da la oscilación.



3. E) Para determinar el valor de la constante K a partir del gráfico debe considerarse que dos átomos ligados formando una molécula estable tendrán una energía potencial $E(r)$ que es una función cuadrática de la diferencia entre su separación x y la separación de equilibrio r_0.

Así, $E(r) = \frac{1}{2}K(r - r_0)^2$ ∴ $K = \frac{2E(r)}{(r-r_0)^2}$ ■

PROBLEMAS RESUELTOS DE COMPRENSIÓN

I. Marque con una **C** las afirmaciones que son correctas y con una **F** las falsas.

a) **C** En la dispersión de un fotón por un electrón libre el cambio de longitud de onda del fotón es independiente de la longitud de onda del fotón incidente.

Argumento: Según la fórmula para la dispersión Compton $\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta)$, de modo que el corrimiento Compton solo depende del ángulo de dispersión.

b) **F** La longitud de onda Compton de un protón es igual a la longitud de onda de De-Broglie de un electrón moviéndose a la velocidad de la luz.

Argumento: La longitud de onda Compton de un protón es: $\lambda_c = \frac{h}{m_p c} = \frac{6.625\times10^{-34}\,J\cdot s}{(1{,}672\times10^{-27}\text{ kg})\times(3\times10^8\,m/s)} = 1.320\times10^{-15}\,m$; la longitud de onda de un electrón que se mueve a la velocidad de la luz es: $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_e c} = \frac{6.625\times10^{-34}\,J\cdot s}{(9.109\times10^{-31}\text{ kg})\times(3\times10^8\,m/s)} = 2.424\times10^{-12}\,m$

c) **F** La energía del primer estado excitado de un oscilador armónico simple mecano-cuántico que tiene una energía E_0 en su estado básico vale $2E_0$ en el primer estado excitado.

Argumento: La energía del nivel $n - ésimo$ de un oscilador armónico cuántico es; $E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

En el estado base: $E_0 = \hbar\omega/2$ y en el primer estado excitado vale: $E_1 = 3\hbar\omega/2 \neq 2E_0$.

d) **C** La ley de Stefan-Boltzmann plantea que la densidad espectral de la energía (W/m^2) emitida por un cuerpo negro que se encuentra a temperatura absoluta T es proporcional a la cuarta potencia de esta.

Argumento: La ley de Stefan-Boltzmann establece que $E = \sigma T^4$; $= 5.669 \times 10^{-8}\ W\ m^{-2}\ K^{-4}$.

e) **F** El efecto fotoeléctrico en los metales es cuando por la interacción de fotones de energía menor que el trabajo de extracción del metal con electrones ligados.

Argumento: La ecuación para el efecto fotoeléctrico es: $T = h\nu - w_0$, si la energía de los fotones incidentes, $h\nu$, es menor que la función de trabajo del material w_0, la energía cinética de los electrones sería negativa; es decir, $T < 0$, lo cual implica que no hay producción de fotoelectrones.

f) **F** El momento magnético orbital de un electrón en un estado p del átomo de H es igual a dos magnetones des Bohr, μ_B.

Argumento: el momento magnético de un electrón es: $\mu = -\left(\frac{e}{2m}\right) L$; pero para un electrón en el estado p, $|\boldsymbol{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$, con $l = 1$; es decir que: $\mu = -\left(\frac{e}{2m}\right)\hbar\sqrt{2}$, y como $\mu_B = \left(\frac{e\hbar}{2m}\right)$, se tiene por tanto que $\mu = -\sqrt{2}\mu_B$.

g) **C** El momento magnético de espín de un electrón en un estado p del átomo de H es igual a $3^{1/2}\mu_B$.

Argumento: el momento magnético de espín es: $|m_s| = g\frac{e}{2m_e}|\boldsymbol{S}| = \frac{\sqrt{3}\,e}{2m_e}\hbar$; $g \approx 2$. Aunque en realidad no depende del estado p.

h) **F** El número cuántico de espín aparece como resultado de resolver la ecuación de Schrödinger no-relativista para el movimiento de un electrón en el átomo bajo la acción del potencial electrostático coulombiano entre él y el núcleo.

Argumento: Los números cuánticos obtenidos al resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo bajo la acción de un potencial de Coulomb en coordenadas polares esféricas son n, l y m_l, estos se obtienen de resolver las ecuaciones separables para $R(r)$, $\Theta(\theta)$ y $\Phi(\varphi)$ correspondientes a la solución $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$. El número cuántico de espín aparece en la teoría de Dirac.

i) **C** La condición de cuantización del momento angular orbital en el modelo de Bohr es una consecuencia del Principio de indeterminación de Heisenberg.

Argumento: La cuantización espacial, del momento angular se debe al principio de incertidumbre, ya que si $\boldsymbol{L}$ apuntara en una dirección específica, digamos la dirección Z, en vez de describir un cono, el movimiento del electrón estaría confinado al plano XY lo cual solo puede ocurrir si la componente de su momento p_z es infinitamente incierta, lo que es imposible si es parte de un átomo de hidrógeno. En realidad, únicamente la componente L_z de $\boldsymbol{L}$ junto con su magnitud $L = |\boldsymbol{L}| > L_z$ tienen valores definidos, de modo que el electrón no está confinado a un plano único. La dirección del momento angular cambia constantemente y los valores promedio de L_x y L_y son cero, aunque, L_z tenga siempre el valor específico $m_l\hbar$.

j) **C** El número de fotones por segundo contenidos en $6.2\ W$ de radiación de frecuencia $10^{12}\ Hz$ es igual a 10^{22}.

Argumento: La energía de un fotón de $10^{12}\ Hz$ es $E = h\nu = (6.625 \times 10^{-34} J \cdot s) \times (10^{12}\ s^{-1}) = 6.25 \times 10^{-22} J$; Entonces, 10^{22} fotones portan una energía $E = (6.25 \times 10^{-22} J) \times 10^{22} = 6.25\ J$. Así que cada segundo se tendrá $6.25\ W$.

FORMULARIOS

IDENTIDADES TRIGONOMÉTRICAS

$sen^2x + cos^2x = 1$
$1 + tan^2x = sec^2x$
$1 + cot^2x = csc^2x$
$tan\,x = sen\,x / cos\,x$
$csc\,x = 1 / sen\,x$
$sec\,x = 1 / cos\,x$
$cot\,x = 1 / tan\,x = cos\,x / sen\,x$
$1 + cotg^2\,x = cosec^2\,x$
$sin\,(a \pm b) = sin\,a \cdot cos\,b \pm cosa \cdot sin\,b$
$cos\,(a \pm b) = cos\,a \cdot cos\,b \mp sin\,a \cdot sin\,b$

$sin\,2a = 2\,sin\,a \cdot cos\,a$
$cos\,2a = cos^2\,a - sin^2\,a\;\; tg\,2a = 2\,tg\,a\,/\,1 - tg^2\,a$
$sin(a/2) = \pm a(1 - cosa)/(2)\;\; cos(a/2)$
$= \pm a(1 + cos\,a)/(2)$
$tg(a/2) = \pm a(1 - cosa)/(1 + cos\,a)$
$sin\,a + sin\,b = 2 \cdot sin\,(a+b)/2 \cdot cos\,(a-b)/2$
$sin\,a - sin\,b = 2 \cdot cos\,(a+b)/2 \cdot sin\,(a-b)/2$
$cos\,a + cos\,b = 2 \cdot cos\,(a+b)/2 \cdot cos\,(a-b)/2$
$cos\,a - cos\,b = -2 \cdot sin\,(a+b)/2 \cdot sin\,(a-b)/2$

TABLA DE DERIVADAS

FUNCIÓN	FUNCIÓN DERIVADA	FUNCIÓN	FUNCIÓN DERIVADA
$Y = k$	$Y' = 0$	$Y = x$	$Y' = 1$
$Y = u \pm v \pm w$	$Y' = u' \pm v' \pm w'$	$Y = u \cdot v$	$Y' = u \cdot v' + u' \cdot v$
$Y = \frac{u}{v}$	$Y' = \frac{v \cdot u' - v' \cdot u}{v^2}$	$Y = Log_k\,u$	$Y' = \frac{u'}{u} \cdot Log_k\,e$ (*)
$Y = u^n$	$Y' = u' \cdot n \cdot u^{n-1}$	$Y = L_n\,u$	$Y' = \frac{u'}{u}$
$Y = k^u$	$Y' = u' \cdot k^u \cdot L_n\,k$ (*)	$Y = e^u$	$Y' = u' \cdot e^u$
TRIGONOMÉTRICAS		TRIGONOMÉTRICAS	
$Y = sen\,u$	$Y' = u' \cdot cos\,u$	$Y = cosec\,u$	$Y' = -u' \cdot cosec\,u \cdot cotg\,u$
$Y = cos\,u$	$Y' = -u' \cdot sen\,u$	$Y = sec\,u$	$Y' = u' \cdot sec\,u \cdot tg\,u$
$Y = tg\,u$	$Y' = u' \cdot (1 + tg^2\,u) = (**)$	$Y = cotg\,u$	$Y' = -u' \cdot cosec^2\,u$
$Y = arsen\,u$	$Y' = \frac{u'}{\sqrt{1 - u^2}}$	$Y = arcosec\,u$	$Y' = \frac{-u'}{\lvert u \rvert \cdot \sqrt{u^2 - 1}}$
$Y = arcos\,u$	$Y' = \frac{-u'}{\sqrt{1 - u^2}}$	$Y = arsec\,u$	$Y' = \frac{u'}{\lvert u \rvert \cdot \sqrt{u^2 - 1}}$
$Y = artg\,u$	$Y' = \frac{u'}{1 + u^2}$	$Y = arcotg\,u$	$Y' = \frac{-u'}{1 + u^2}$
$Y = u^v$	$Y' = v' \cdot u^v \cdot L_n\,u + v \cdot u^{v-1} \cdot u'$		

$Y = f(x) \Rightarrow L_n Y = L_n\,f(x) \Rightarrow (Y'/Y) = (L_n\,f(x))' \Rightarrow Y' = Y \cdot (L_n\,f(x))'$

(*) $L_n\,k = 1/(Log_k\,e)$; (**) $= u'/(cos^2\,u) = u' \cdot sec^2\,u$;

u,v,w son funciones de x ; u' es la derivada de u respecto de x, u'=du/dx ; k es una cte.
L_n es Log base e ; n y b son números racionales ; |u| es valor absoluto de u.

TABLA DE INTEGRALES

FUNCIÓN	FUNCIÓN INTEGRAL	FUNCIÓN	FUNCIÓN INTEGRAL
$\int k\,du = k\int du$	$k \cdot u$	$\int k\,u(x)\,dx$	$k\int u(x)\,dx$
$\int (u \pm v \pm w)\,du$	$\int u\,dx \pm \int v\,dx \pm \int w\,dx$	$\int u^n\,du$	$\frac{u^{n+1}}{n+1}$
$\int u\,dv$	$u \cdot v - \int v \cdot du$ (por partes)	$\int f(kx)\,dx$	$\frac{1}{k} \cdot \int f(u)\,du$
$\int \frac{du}{u}$	$L_n\,\lvert u\rvert$	$\int e^u\,du$	e^u
$\int k^u\,du$	$\frac{k^u}{L_n\,k}$; $k > 0$; $k \neq 1$	$\int \sqrt{u}\,du$	$\frac{u^{3/2}}{3/2} = \frac{2 \cdot u^{3/2}}{3}$
$\int \operatorname{sen} u\,du$	$-\cos u$	$\int \cos u\,du$	$\operatorname{sen} u\,du$
$\int \operatorname{tg} u\,du$	$L_n \sec u = -L_n \cos u$	$\int \operatorname{cotg} u\,du$	$L_n \operatorname{sen} u$
$\int \sec^2 u\,du$	$\operatorname{tg} u$	$\int \operatorname{cosec}^2 u\,du$	$-\operatorname{cotg} u$
$\int \sec u \cdot \operatorname{tg} u\,du$	$\sec u$	$\int \operatorname{cosec} u \cdot \operatorname{cotg} u\,du$	$-\operatorname{cosec} u$
$\int \sec u\,du$	$L_n (\sec u + \operatorname{tg} u) = L_n \operatorname{tg}(u/2)$	$\int \operatorname{cosec} u\,du$	$L_n \operatorname{tg}(u/2)$
$\int \operatorname{sen}^2 u\,du$	$(\frac{1}{2})\,u - (\frac{1}{4})\operatorname{sen}(2u)$	$\int \cos^2 u\,du$	$(\frac{1}{2})\,u + (\frac{1}{4})\operatorname{sen}(2u)$
$\int \operatorname{tg}^2 u\,du$	$-u + \operatorname{tg} u$	$\int \sec^2 u\,du$	$\operatorname{tg} u$
$\int \frac{\operatorname{sen} u}{\cos^2 u} \cdot du$	$\sec u$	$\int \frac{\cos u}{\operatorname{sen}^2 u} \cdot du$	$-\operatorname{cosec} u$
$\int \frac{du}{\sqrt{1 - u^2}}$	$\operatorname{arsen} u = -\arccos u$	$\int \frac{du}{1 + u^2}$	$\operatorname{artg} u = -\operatorname{arcotg} u$
$\int \frac{du}{u^2 + k^2}$	$\frac{1}{k} \cdot \operatorname{artg} u$	$\int \frac{du}{u^2 - k^2}$	$\frac{1}{2k} L_n \frac{u - k}{u + k}$
$\int \frac{du}{k^2 - u^2}$	$\frac{1}{2k} L_n \frac{k + u}{k - u}$	$\int \frac{du}{\sqrt{k^2 + u^2}}$	$L_n (u + \sqrt{k^2 + u^2})$
$\int \frac{du}{\sqrt{k^2 - u^2}}$	$\operatorname{arsen} \frac{u}{k}$	$\int \frac{du}{u\sqrt{u^2 - k^2}}$	$-\frac{1}{k} \cdot \operatorname{arcosec} \frac{u}{k}$

(*) En todas las integrales hay que sumar la cte de integración ; $k \in R$; $n \in Q$; u, v, w funciones de x.

CONSTANTES	VALOR (con tres cifras significativas)
Cantidad de sustancia que contiene tantas entidades elementales, como átomos hay en 12 gramos de carbono-12.	$1\ mol = 6.022 \times 10^{23}$ moléculas
Número de Avogadro.	$N_A = 6.022 \times 10^{23}\ mol^{-1}$
Constante universal de los gases.	$R = 0.082\ atm \cdot L/(mol \cdot K)$
Constante de Boltzmann	$k_B = 1.380 \cdot 10^{-23} J/K$
Velocidad de la luz.	$c = 3 \times 10^8\ m/s$
Permitividad del vacío.	$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} C^2/J \cdot m$
Permeabilidad magnética.	$\mu_0 = 4\pi \times 10^7 N \cdot s^2/C^2$
Constante de Planck.	$h = 6.625 \times 10^{-34} J \cdot s = 4.135 \times 10^{-15}\ eV \cdot s$
Constante de Reducida Planck.	$\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-34} J \cdot s = 6.582 \times 10^{-16}\ eV \cdot s$
Constante de Wien.	$b = 2.897 \times 10^{-3}\ m \cdot K$
Constante de Stefan-Boltzmann.	$\sigma = 5.669 \times 10^{-8}\ W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4}$
Carga del electrón	$e = -1.602 \times 10^{-19}\ C$
Masa del electrón	$m_e = 9.109 \times 10^{-31}\ kg = 0.510\ MeV/c^2$
Energía del electrón en reposo	$m_e c^2 = 0.510\ MeV$
Masa del protón	$m_p = 1.672 \times 10^{-27}\ kg = 978.272\ MeV/c^2$
Masa del neutrón	$m_n = 1.674 \times 10^{-27}\ kg = 939.565\ MeV/c^2$
Radio de Bohr	$a_0 = (4\pi\epsilon_0\hbar^2)/(m_e e^2) = 0.529 \times 10^{-10} m$
Constante Coulombiana	$1/4\pi\varepsilon_0 = 9 \times 10^9\ N \cdot m^2/C^2$
Constante de Rydberg para el hidrógeno	$R_H = 1.096 \times 10^7 m^{-1}$, $R_\infty = 1.097 \times 10^7 m^{-1}$
Magnetón de Bohr	$\mu_B = 9.27 \times 10^{-24}\ J/Tesla$
FACTORES DE CONVERSIÓN	
$1u = 1.661 \times 10^{-27}\ kg$	
1 Å $= 1.0 \times 10^{-10}\ m$	
$1\ J = 6.241\ \times 10^{18}\ eV$	$1\ eV = 1.602\ \times 10^{-19}\ J$
$1\ J = 0.237\ cal$	$1\ cal\ (a\ 15°) = 4.186\ J$
$1\ kWh = 3.600 \times 10^6\ J$	
EQUIVALENCIA DE MASA Y ENERGÍA	
$1\ u = 931.5\ MeV$	$1\ eV = 1.074\ \times 10^9\ u$
$1\ kg = 8.988 \times 10^{16}\ J$	

MECÁNICA Y ELECTROMAGNETISMO	Fórmulas
Momento angular:	$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$
Campo magnético generado por un alambre con corriente:	$\boldsymbol{B} = \mu_0 i \hat{\boldsymbol{\theta}}/2\pi r$
Campo magnético generado por una espira de corriente:	$B = \mu_0 i/2r \; [1\,T = 1\,N/A \cdot m]$
Momento magnético de una espira:	$\lvert\boldsymbol{\mu}\rvert = iA$
Fuerza de Lorentz:	$\boldsymbol{F} = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B})$

Ecuaciones de Maxwell	Forma diferencial	Forma integral
Ley de Gauss:	$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}; \rho = \frac{Q}{V}$	$\oint_S \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{s} = \frac{Q}{\epsilon_0}$
Ley de Gauss para el campo magnético:	$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0$	$\oint_S \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{s} = 0$
Ley de Faraday:	$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}$	$\oint_C \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{l} = -\frac{d}{dt}\int_S \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{s}$
Ley de Ampere generalizada:	$\nabla \times \boldsymbol{B} = \mu_0 \boldsymbol{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}$	$\oint_C \boldsymbol{B} \cdot d\boldsymbol{l} = \mu_0 \int_S \boldsymbol{J} \cdot d\boldsymbol{s} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{d}{dt}\int_S \boldsymbol{E} \cdot d\boldsymbol{s}$

Onda electromagnética:	$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E_0}\, sin(kx - \omega t + \phi)$ $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B_0}\, sin(kx - \omega t + \phi)$
Número de onda:	$\mathrm{k} = 2\pi/\lambda \; [\mathrm{rad/m}]$
Frecuencia angular	$\omega = 2\pi\nu \; [rad/s]$
Velocidad de la onda electromagnética:	$c = \lambda\nu$
Polarización de una onda electromagnética:	$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B}/\mu_0 \; [J/s \cdot m^2] = [W/m^2]$
Potencia transportada por una onda electromagnética:	$P = \lvert\boldsymbol{S}\rvert = \left\lvert \boldsymbol{E} \times \frac{\boldsymbol{B}}{\mu_0} \right\rvert = \frac{1}{\mu_0 c} E_0^2\, sin^2(kx - \omega t + \phi)$
Relación entre el campo eléctrico y el campo magnético en una onda electromagnética:	$\boldsymbol{E} = c\boldsymbol{B}$
Potencia promedio:	$\bar{P} = \frac{1}{T}\int_0^T P dt = \frac{E_0^2}{2\mu_0 c}$
Ecuación de onda:	$\nabla^2 \psi(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t^2}$
Velocidad de fase:	$v_p = \lambda\nu = \frac{\omega}{k}$
Velocidad de grupo:	$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$
Ecuaciones de Maxwell en medios no conductores:	$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 0, \nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0,$ $\nabla \times \boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = 0, \; \nabla \times \boldsymbol{B} - \frac{\epsilon\mu}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = 0$
Ondas electromagnéticas en medios no conductores:	$\nabla^2 \boldsymbol{E} - \frac{\epsilon\mu}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2} = 0, \nabla^2 \boldsymbol{B} - \frac{\epsilon\mu}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{B}}{\partial t^2} = 0.$
Onda electromagnética plana, monocromática:	$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{E}_0 e^{i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)}, \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{B}_0 e^{i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t)}$

LEYES DE LA TERMODINÁMICA	Fórmulas
Ley Cero:	$\exists\, \theta_{empírica}$
1ª Ley de la conservación de la energía:	$\Delta U = Q - W$
2ª Ley de la Entropía:	$S = k_B \cdot ln\, \Omega$
3ª Ley de Nernst:	$T \to 0\, K \;\; \Rightarrow S \to Cte.$
La ley de los gases ideales o ecuación de estado:	$PV = nRT = Nk_BT$
Ecuación cinética térmica media para las moléculas de un gas ideal:	$E_c = \frac{3}{2}k_BT$

RELATIVIDAD	Fórmulas
Transformaciones de Lorentz:	$x' = [x - vt]\gamma, \quad y' = y, \quad z' = z\,; \quad t' = [t - vx/c^2]\gamma$
Factor de Lorentz:	$\gamma = [1 - v^2/c^2]^{-1/2} \geq 1$
Dilatación del tiempo:	$t = t_0\gamma$
Contracción de la longitud:	$L = L_0/\gamma$
Efecto Doppler relativista:	$\nu' = \nu\frac{\sqrt{1-u^2/c^2}}{1-u/c} = \nu\sqrt{\frac{1+u/c}{1-u/c}}$
Transformación relativista de la velocidad:	$V_x = \frac{V_x' + v}{1+\frac{vV_x'}{c^2}}, \quad V_y = \frac{V_y'\sqrt{1-v^2/c^2}}{1+\frac{vV_y'}{c^2}}, \quad V_z = \frac{V_z'\sqrt{1-v^2/c^2}}{1+\frac{vV_z'}{c^2}}$
Relatividad de la masa:	$m = m_0\gamma$
Energía total de una partícula:	$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}$

LEYES DE LA RADIACIÓN TÉRMICA	Fórmulas
Potencia total radiada por un cuerpo negro:	$R_T = \int_0^\infty R_T(\nu)d\nu \;\; [W/m^2]$
Intensidad espectral:	$I_T(\nu) = \frac{2h\nu^3}{c^2}\left[e^{h\nu/kT} - 1\right]^{-1}[J \cdot m^{-2} \cdot Sr^{-1}]$
La densidad espectral:	$\rho_T(\nu) = \frac{dR_T(\nu)}{d\nu} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\left[e^{h\nu/kT} - 1\right]^{-1}[J \cdot s \cdot m^{-3}]$
Ley de radiación de Planck:	$R_T(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}$
Ley de Stefan-Boltzmann:	$R_T \triangleq \int_0^\infty R_T(\nu)d\nu = aT^4$
Emisividad:	$R_T = \varepsilon\sigma T^4$
Ley de desplazamiento de Wien:	$\lambda_{max} \cdot T = 2.897 \times 10^{-3} m \cdot K$
Ley de Rayleigh-Jeans:	$\rho_T(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3}d\nu$
Densidad de energía radiada:	$\rho_T(\nu)d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\left[e^{h\nu/kT} - 1\right]^{-1}d\nu$

FUNDAMENTOS DE CUÁNTICA	Fórmulas
Efecto fotoeléctrico:	$T_{max} = h\nu - W_0$
Efecto Compton:	$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - cos\,\phi)\ ; \frac{h}{m_e c} = 0.024\ \text{Å}$
Rayos X:	$\lambda_{min} = \frac{hc}{eV} = \frac{hc}{h\nu_{max}}$
Ley de Bragg:	$2d \cdot sin\,\theta = n\lambda,\ \ n\ \in \mathbb{N}.$
Producción y aniquilación de pares:	$h\nu = K_- + K_+ + 2m_0c^2$
Difracción de partículas:	$I(x) \propto \lvert E_1(x) + E_2(x)\rvert^2 = A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2\,cos(\theta_1 - \theta_2)$
Interferencia constructiva:	$\lvert r_1 - r_2\rvert = n\lambda = d(sin\,\theta_2 - sin\,\theta_1) = \lambda$
Interferencia destructiva:	$\lvert r_1 - r_2\rvert = (n + 1/2)\lambda$
Hipótesis de De Broglie:	$\lambda_B = \frac{h}{mv}$
Velocidad de fase:	$v_p = \frac{\omega}{k}$
Velocidad de grupo:	$v_g = \frac{d\omega}{dk}$
Incertidumbre de Heisenberg:	$\Delta x \Delta p_x\ \geq\ \hbar/2$
Indeterminación del tiempo-energía:	$\Delta E \Delta t\ \geq\ \hbar/2$

MECÁNICA CUÁNTICA	Fórmulas
Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:	$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi$
Función de densidad de probabilidad:	$P(x,t)dx \equiv \lvert\Psi(x,t)\rvert^2 dx \equiv \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$
Ecuación de Schrödinger en estado estacionario:	$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0$
Valor de expectación:	$\langle G(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G(x)\lvert\Psi\rvert^2 dx$
Operador diferencial p:	$p[\Psi(x,t)] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}[\Psi(x,t)]$
Operador diferencial E:	$E[\Psi(x,t)] = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[\Psi(x,t)]$

APLICACIONES DE MECÁNICA CUÁNTICA	Fórmulas
Ecuación de Schrödinger para la partícula libre:	$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)$
Solución general de la E. de S. para la partícula libre:	$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$
Valor de expectación del impulso p:	$\langle p\rangle=\int_{-L/2\to-\infty}^{L/2\to\infty}\Psi^*\sqrt{2mE}\Psi dx=\sqrt{2mE}$
Potencial escalón:	$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi=0$
Caso E $<$ V_0:	$Ae^{ikx}+Be^{-ikx}=De^{-q_<x};\quad x=0$
Caso E $>$ V_0:	$\psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx};\quad x<0.$ $\psi=Ce^{iq_>x}+De^{-iq_>x};\ x>0.$
Probabilidad de que la partícula se transmita:	$T=\frac{4kq}{(k+q_>)^2}$
Barrera de Potencial:	$I:\psi_I''+k^2\psi_I=0\ \Rightarrow\ \psi_I=A_1e^{ikx}+B_1e^{-ikx}$ $II:\psi_{II}''+q_<^2\psi_{II}=0\ \Rightarrow\ \psi_{II}=A_2e^{q_<x}+B_2e^{-q_<x}$ $III:\psi_{III}''+k^2\psi_{III}=0\ \Rightarrow\ \psi_{III}=A_3e^{ikx}+B_3e^{-ikx}$
El pozo de potencial infinito unidimensional:	$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2};\quad n\in\mathbb{N}-\{0\}$
Potencial bidimensional de lados L_x y L_y:	$E_{n_x,n_y}=\frac{\pi\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}\right)$
El pozo de potencial infinito en tres dimensiones:	$E_{n_x,n_y,n_z}=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{L_x^2}+\frac{n_y^2}{L_y^2}+\frac{n_z^2}{L_z^2}\right)$
El oscilador armónico simple:	$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)h\nu;\quad n=0,1,2,3,\ldots$

EL ÁTOMO DE UN ELECTRÓN	Fórmulas
Fórmula de dispersión de Rutherford:	$N(\theta) = N_i nt\left(\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0\, r\, mv^2\, sin^2(\theta/2)}\right)^2$
Lyman (UV)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right); n = 2,3,4,\ldots$
Balmer (Visible)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right); n = 3,4,5,\ldots\ (H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, \ldots)$
Paschen (IR)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right); n = 4,5,6,\ldots$
Brackett (IR)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right); n = 5,6,7,\ldots$
Pfund (IR)	$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}\right); n = 6,7,8,\ldots$
Fórmulas de las series para átomos alcalinos (Li, Na,):	$\frac{1}{\lambda} = R_X\left[\frac{1}{(m-a)^2} - \frac{1}{(n-b)^2}\right]$
Hidrogenoides:	$\frac{1}{\lambda} = R_X Z^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$
Radio de Bohr:	$r_n = 4\pi\varepsilon_0 \frac{n^2\hbar^2}{m_e Ze^2} = \frac{n^2 a_0}{Z}$
Energía de Bohr:	$E_n = -\frac{m_e Z^2 e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$
Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en coordenadas esféricas:	$-\frac{\hbar^2}{2\mu_e}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi) + V(r)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$
	$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\, sin^2\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\, sin^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$
Energía total:	$E_n = -\frac{\mu_e Z^2 e^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} = \frac{13.6\ eV}{n^2}$
Números cuánticos principal, orbital y magnético:	$n = 1,2,3,\ldots,$ $l = 0,1,2,3,\ldots,(n-1)$ $m_l = 0,\pm1,\pm2,\pm3,\ldots,\pm l$
Momento angular del electrón	$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$
	$L_z = m_l\hbar$
Momento magnético μ	$\mu = -\left(\frac{e}{2m}\right)L$
Momento angular debido al espín	$\lvert S\rvert = \hbar\sqrt{s(s+1)} = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$
	$S_z = m_s\hbar = \pm\frac{1}{2}\hbar$
Relación giromagnética del espín electrónico	$m_s = -\frac{e}{m}S$
Momento angular total del átomo:	$J = \hbar\sqrt{j(j+1)}\ ; J = L + S$
	$J_z = L_z \pm S_z;\ m_j\hbar = m_l\hbar \pm m_s\hbar$
Factor de Landé	$\Delta E = \mu_B B g M_J; \quad g = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}$
Frecuencias de Larmor:	$\omega_{Larmor} = \frac{d\phi}{dt} = \frac{e}{2m_e}B$